$$U_E = \frac{\varepsilon_0}{2} \int \vec{E}^2(\vec{r})\, d\tau$$

$$F_m = i \int_A^{A'} d\vec{\ell} \times \vec{B}$$

$$U_m = \frac{1}{2\mu_0} \int_{\text{todo espaço}} \vec{B}^2\, d\tau$$

Mecânica Quântica I

H. Moysés Nussenzveig

UFRJ

3ª } 13 às 15
5ª } s/333

Mecânica Quântica I

UFRJ, 98/2

Aulas extra:
2ª, 8 às 10

Objetivo principal: introd. aos conceitos básicos da MQ – menos ênfase em técnicas e detalhes (curso de PG)

Referências: 1) J.L. Martin, Basic QM, Oxford ('81) → + usada
2) Feynman Lectures, vol. III.
3) C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, QM, Wiley (enciclopédico; + avanç.)
4) Em português: S. Gasiorowicz, Física Quântica, Guanabara 2, Rio ('79)
+ p/ PG: Bohm, Schiff, Merzbacher, Gottfried, Messiah, Landau + Lifshitz, ...
Inicial: HMN, Física Básica, vol. 4 (Bibl.) Dicke-Witthe, ...

Aviso

A MQ ñ é como nada do q foi visto até agora!

Trata de fenômenos na escala atômica e sub-atômica (e suas repercussões macroscópicas). Escala totalᵗᵉ remota da nossa experiência quotidiana: nenhuma razão p/ q intuição desenvolv. nesta escala (macrosc.) permaneça válida na da MQ. "Milagre": apesar disto, foi possível tratar estes fenômenos quantitativaᵗᵉ, c/ gde. precisão (ex.: EDQ). Limites de validade: ainda ñ atingidos, mmo. em fenôms. subnucleares, a $\sim 10^{-15}$ cm.
∴ a MQ se aplica a todos os objetos microscópicos (macroscópicos tb. Fís. Cláss. como limite, mas limite sutil e complicado)

Fís. pré-quântica

Mec. Newtoniana (séc. 17)
Eqs. Maxwell (" 19).
} Física clássica (macrosc.) (incl. Relat. Restr.)

Evidências da quantização da rad. (fótons)
1900: Planck e a rad. térmica.
1905: Einstein: efeito fotoelétrico; 1923: efeito Compton
1911: Rutherford: o núcleo atômico
1913: Átomo de Bohr; a velha teoria quântica
1924/5: Hipótese de de Broglie: ondas de matéria (princípio de corresp.)
1925: Princ. de exclusão (Pauli) | Difração de elétrons: Davisson + Germer (1923)
MQ.: 1926-7 Eq. de Schrödinger (Mec. Ondulatória)
Formul. de Heisenberg; princípio de incerteza
Interpret. probabilística (Born) 1926

Refer. sobre história: M. Jammer, The Conceptual Development of QM (McGraw-Hill, 1966).

Não seguiremos o método histórico.

O que a fís. pré-quântica ñ explica

— A estabilidade da matéria (colapso coulombiano); ex.: sólidos

2] — Quantiz. do mom.to ∡r: expers. de Stern + Gerlach c/ feixes atômicos (1921)

freqs. das raias espectrais como ∑ de "termos" em nº pequeno (⇐ q. de freqs.)

— A ∃cia de átomos (idem) — Os espectros atômicos (em partic., o princípio de combinação de Ritz). — Quantiz. de níveis de energia, observada diretam.te nas expers. de Franck + Hertz (1914): colisões inelásticas de elétrons c/ átomos transferem energia aos átomos somente qdo. o elétron atinge um patamar de energia suf.te (níveis discretos) → Termos espectrais

— Calores específicos dos sólidos; lei de Planck p/ rad. térmica;

— Valores observados das constantes materiais das subst.; ....

Mas: o limite clássico e o princ. de correspondência (Bohr, 1913) "gdes. nºs quânts!"

∴ o estudo da fís. clássica ñ foi tempo perdido!

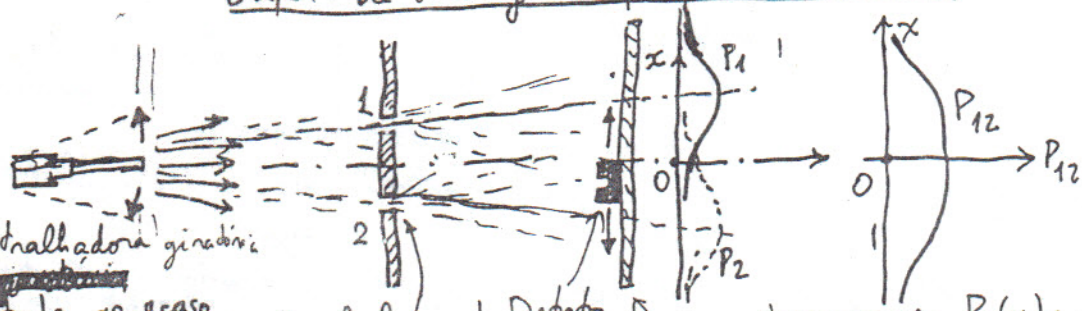
1. INTROD. ± HEURÍSTICA AOS CONCEITOS QUÂNTICOS

1.1. A Dualidade Onda-Partícula

Teorias sobre a natureza da luz: corpuscular (Newton; mas: anéis; "acessos" de transmissão fácil e reflexão fácil); ondulatória (Young: interferência + Fresnel: difração) → → teoria em.ca (ondas EM) e expers. de Hertz → mas: efeito foto e.co.

Depois: propr.s ondulatórias de "partículas" (elétrons; neutrons (dif.)...)

Exper. de Young c/ partículas clássicas



Metralhadora giratória apontada ao acaso

Fica disparando c/ 1 dada taxa/un. tpo.

As balas podem ricochetear

Detector deslizante (varredura) (cxa. c/ areia)

antepara absorvente (moleira)

$P_1(x)$ = distrib. de probab. c/ só 1 aberto (frequ. relativa) | nº q chega c/x / nº total no antep.

— Ñ podemos observar 1 fração de bala (partícula) ↑ balas "inquebráveis" Contagens discretas

— $\boxed{P_{12} = P_{1s.t.} + P_2}$ (1.1)

Cada partíc. passa ou por 1 ou por 2 (eventos indeps. e mutuam.te exclus.: probabs. se somam (nunca por ambos)

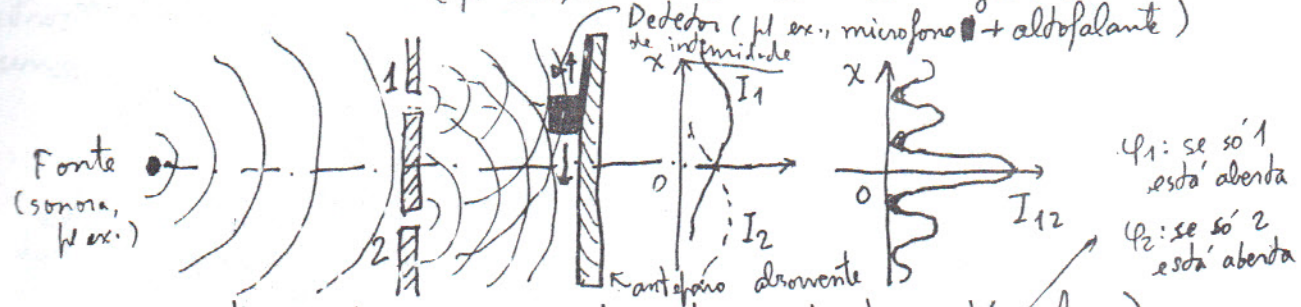
— Se diminuírmos a intens. do bombardeio, as balas vão chegando 1 a 1 e distribuindo-se ao acaso sobre P_{12} (impactos individuais.

— Se fecharmos 1 das fendas, P_{12} só pode diminuir p/ cada x ($P_1 \geq 0$, $P_2 \geq 0$)

$$\varphi_i = Re\left[A_i \frac{e^{i(kr_i-\omega t)}}{r_i}\right] = |A_i| \frac{\cos(kr_i-\omega t+\phi_i)}{r_i}$$

Exper. de Young c/ ondas clássicas

(p/ ex., ondas de som ou na água) [φ = função de onda



— A intensidade varia continuam^te (pode tomar $\forall$ valor)

— $$\boxed{\left.\begin{array}{l} I_1(x) = |\varphi_1(x)|^2 \\ I_2(x) = |\varphi_2(x)|^2 \end{array}\right\} \quad I_{12} = |\varphi_1+\varphi_2|^2 \neq I_1+I_2} \quad (1.2)$$

$= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2}\cos\delta$

δ: defasagem

$\therefore$ $\exists$ interferência; se $I_1 = I_2 = I_0$, I_{12} varia de 0 a $4I_0$ conforme a " seja destrut. ou construt.

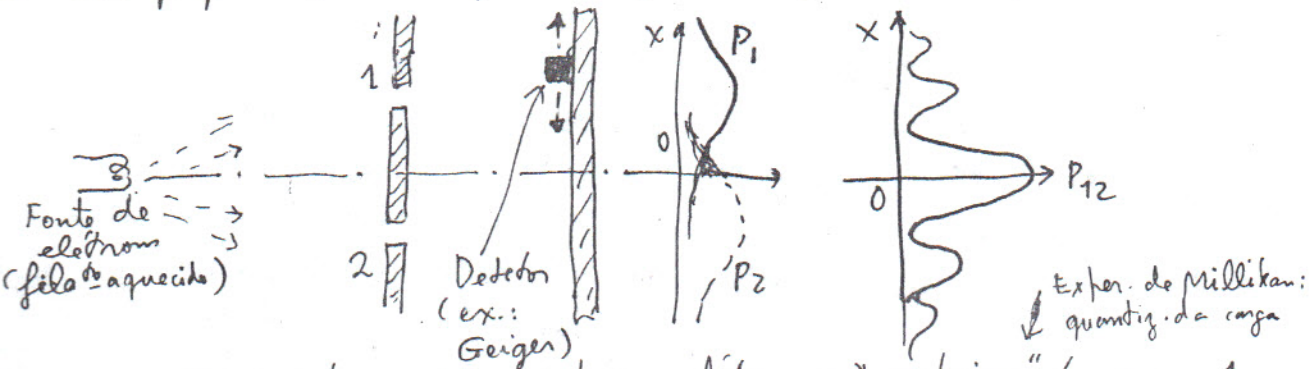
— Se diminuirmos a intens. da fonte, as franjas vão diminuindo uniformem^te de intensidade (fator multiplicativo). caráter contínuo (ñ discreto)

— Se fecharmos 1 das fendas, I_{12} pode aumentar (mín.) ou diminuir (máx.)

Não mais (1991) { c/ elétrons: C. Jönsson, Z. Phys. 161, 454 ('61); Am. J. Phys. 42, 4 ('74) (ñ mto. preciz)
c/ nêutrons frios: A. Zeilinger + al, RMP 60, 1067 (1988)
c/ átomos: O. Carnal + J. Mlynek, PRL 66, 2689 (1991)

Exper. de Young c/ elétrons

"Gedankenexperiment": as dimensões (escala) teriam de ser m^to pequenas; mas pode ser feita c/ fótons



— O detetor só registra elétrons "inteiros" (nunca 1 "fração de elétron" (como p/ partícs. cláss.)

— $$\boxed{P_{12} \neq P_1 + P_2} \quad (1.3)$$ Há interferência! (como p/ ondas cláss.)

— Se diminuirmos a intens. da fonte, os elétrons vão chegando 1 a 1 em ptos. x ao acaso (como p/ partícs. cláss.), mas acumulando as contagens durante 1 tpo. longo reproduzem P_{12} (como p/ ondas cláss.)

— Fechando 1 das fendas, P_{12} pode diminuir, mas tb. pode aumentar (num mínimo), o q é

inexplicável por 1 modelo de interações complicadas entre partícs. cláss. e as fendas (como ondas cláss.)

Conclusão: Os elétrons (neutrons, átomos, ...) não são NEM partícs. clássicas NEM ondas clássicas.

MAS, conforme veremos,

$$\boxed{\left.\begin{array}{l} P_1 = |\psi_1(x)|^2 \\ P_2 = |\psi_2(x)|^2 \end{array}\right\} \quad P_{12} = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2,} \quad (1.4)$$

Não podemos predizer a posição x de chegada de cada elétron individual, só a probabilidade!

ou seja, ∃ 1 "função de onda" $\psi(x)$ q representa 1 amplitude de probabilidade (pq. $P = |\psi(x)|^2$) e p/ a qual vale o princípio de superposição ($\psi_{12} = \psi_1 + \psi_2$), q leva a interferências, como p/ ondas clássicas — ao mmo tpo. q determina a distrib. de probab. de observar o elétron ("inteiro", como 1 partíc. clássica) em x. Esta "dualidade onda-partícula" reconcilia os 2 aspectos, conforme veremos.

Interpret. probabilística

Se o elétron é descrito por 1 função de onda q só determina a probab. de observá-lo num determinado pto. x, como predizer em q pto. 1 determinado elétron vai parar numa dada observação?

Mas prediz níveis de energia e outros observáveis c/ gde. precisão (até ~ 15 decimais)

A MQ NÃO prediz isto! De modo geral ela ñ faz predições p/ eventos individuais na escala atômica, predizendo apenas a probab. de sua ocorrência (q, em casos limites, pode ser 0 ou 1: p/ ex., é 0 nos ptos. "escuros" das franjas de interferência de Young), ou seja, as predições referem-se a 1 dada experiência repetida mtas. vezes, tendo caráter estatístico. Átomo radioativo: prediz a taxa, mas ñ o instante da desintegração

≠ça fundamental c/ o conceito de determinismo da fís. clássica. Einstein: "Ñ acredito q Deus jogue dados"

↖ MAS: Caos determinístico na Mec. Clássica tb. é limitação forte

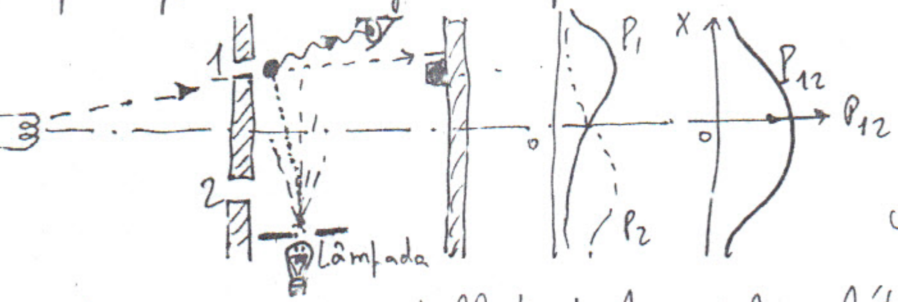
"Puro acaso" e interação c/ o resto do universo

∃ 1 teoria + completa, capaz de predizer o q ocorre em cada evento individual? (teorias de "variáveis ocultas"). Todas as tentativas falharam, e experiências mto. refinadas (vide final do curso) mostram q 1 tal teoria deveria ter características mto. estranhas e complicadas. Ñ há nenhuma evidência experimental da ∃cia. de ∀ tipo de "variáveis ocultas".

(A MQ tb. tem) Não-localidade da MQ (ñ contradiz causalidade Einsteiniana) Discussão: fim do curso.

Observação dos elétrons

O resultd. (1.3) é incompatível c/ a idéia de q os elétrons ou passam por 1 ou por 2. Q acontece se tentarmos observar por qual das fendas passam?



como partíc. carregada, espalha 1 onda esf. incidente

Podemos fazer isso c/ espalhamto. de luz pelo elétron: o flash de luz é sempre observado ou junto de 1 ou de 2, nunca junto de ambos (ao mmo. tpo.) (se o feixe de elétrons é sufte. fraco p/ q venha 1 de cada vez). Contando separadamte. os 2 casos, obtemos $P_1(x)$ p/ os q passam por 1 e $P_2(x)$ p/ os q passam por 2 (c/ ambas as fendas abertas, o q ⇒ ñ haver influência de 1 fenda sobre 1 elétron q ñ passa por ela). Mas isto tb. ⇒ q a distrib. total agora é

se todos os elétrons são observados (luz sufte. intensa!)

$$P_{12} = P_1 + P_2, \quad (1.5)$$

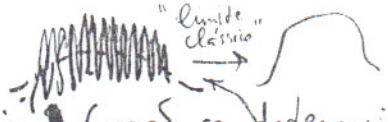
ou seja, o espalhamto. de luz (capaz de identificar o trajeto) destrói a interferência! ← Pelo do Princípio de Incerteza

Vemos ∴ q o processo de observação na escala atômica (microscópica) pode afetar drasticamte. os resultados. Na fís. clássica, 1 observ. tb. perturba o resultado, mas a perturbação pode ser levada em conta e, em princípio, reduzida a um nível arbitrariamte. pequeno.

É possível diminuir o efeito do espalhamto. de luz sobre os elétrons? Podemos tentar diminuir a intensidade, o q, classicamte., diminuiria a interação. Mas a luz tb. é formada de fótons (← universalidade da dualidade onda-partícula), e a diminuição da intensidade ñ altera a interação de cada fóton c/ 1 elétron: equivale a diminuir o nº de fótons / un. de tpo. e área. Isso traz como consequência uma redução da probab. de q 1 elétron encontre 1 fóton (produzindo espalhamto.) ao passar por 1 das fendas. Assim, há elétrons q atingem o detector sem ter espalhado 1 fóton, ou seja, sem q se possa dizer se passaram por 1 ou 2 (elétrons tipo "3"). O resultado é q, p/ os elétrons tipo 1 ou 2 (q passaram pela fenda 1 ou 2), vale a (1.5), ao passo q os elétrons tipo 3 obedecem a (1.4) ∴ a interferência

↑ rotuláveis c/ 1 dispositivo de anti coincidências

6) A MQ vale p/ toda a matéria, ∴ tb. p/ as balas da 1ª exper. (proprs. ondulat.) | MAS



(oscil. c/ λ ≤ poder separador do instrum.)

é (não é) destruída qdo. se determina (não se determina) por que fenda cada elétron passa.

DESCOERÊNCIA: v. fim do curso

A perturbação de 1 elétron s/ alterar a intensidade por 1 fóton diminui qdo. se diminui a energia do fóton, ou seja, pela relação de Einstein $E = h\nu$, qdo. se diminui ν, aumentando o comprit.º de onda λ. Por este caminho, verifica-se q, de fato, p/ "λ suf.te gde.", volta-se da (1.5) à (1.4), restabelecendo a interferência. Mas isto acontece precisa.te qdo. λ se torna > ou da ordem da distância d entre as fendas. Devido às proprs. ondulatórias da luz, nessa situação, é impossível dizer se a luz espalhada provém da fenda 1 ou da fenda 2!

poder separador: ñ dá p/ localizar c/ $\Delta x < \lambda$

difração

O resultado dessa "conspiração" é: amplitudes de probab. correspondentes a caminhos ≠s interferem qdo. a observação ñ permite distinguir qual dos caminhos foi seguido, e ñ interferem qdo. é possível distingui-los. (mesmo que só em princípio)

Logo, na escala quântica, o processo de observação pode influir de modo decisivo e irremovível no resultado observado. Como observa Dirac, isto define, pela 1ª vez na física, 1 escala absoluta de "tamanho": "gde." e "peq." deixam de ser apenas conceitos relativos: a escala atômica é "pequena" no sentido acima da perturbação irremovível exercida pelo processo de observação. Conforme veremos, a MQ introduz 1 escala absoluta de "ação", através da constante universal de Planck h: 1 ação "gde" é $\gg h$, o q ocorre na escala macroscópica. É 1 limite absoluto na capacidade de observação, da mma. forma q c é a veloc. limite na relativ.

1º Probl.: Como se descreve o estado de 1 sistema quântico?

1.2. Luz linear.te polarizada

1 sist. particular.te simples p/ ilustrar o conceito de estado quântico é 1 feixe de luz linear.te polarizada.

Descr. clássica: Onda em.ca plana monocromática linear.te polarizada no vácuo

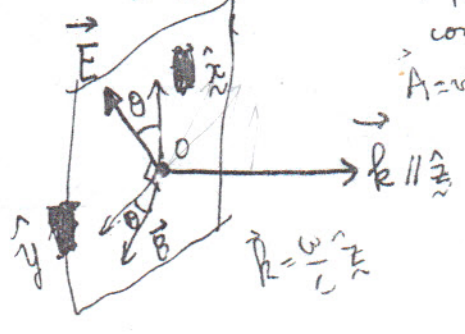
$$\boxed{\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{A}\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t + \varphi)}} \quad (1.6)$$

$\vec{A}$ = vetor real

Notação complexa | subentende-se: Re(...)

$\vec{A}$ = vetor real ∴ $\vec{E} = \vec{A}\cos(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t + \varphi)$ ← Intens. $\propto |\vec{A}|^2$

$\boxed{\vec{k}\cdot\vec{A} = 0}$ (onda transv.)

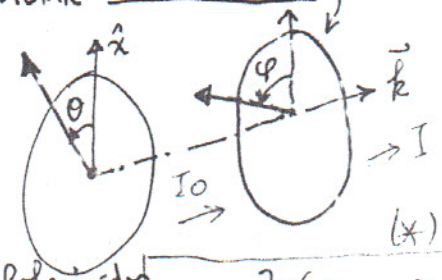


linear.te pol. ≡ direção de $\vec{A}$ fixa; pode

ser especific. pelo ∡ θ q faz c/ 1 direção fixa ($\hat{x}$, p/ ex.) (θ e $\theta+\pi$ definem a mma polariz. linear). Designamos essa polar. por P_θ $(0 \leq \theta < \pi)$.

COMO PRODUZIR: Na prática: luz q passou por 1 (monocromador, colimador e) polarizador (filtro Polaroid, prisma de Nicol) c/ "(orientação) ∡ θ". Uma vez q definimos a dir. de propag. ($\parallel \vec{k}$), a frequência ∡r (ω), a amplitude $|\vec{A}|$ e fase φ, e a direção de polarização linear θ, o estado do feixe de luz está completam.te especificado.

COMO DETETAR: Analisador



Polarizador

$$\boxed{\cos^2(\theta-\varphi)} \quad (*)$$

$\frac{I}{I_0}$

Fato experimental:
Luz c/ polariz P_θ passando por 1 polarizador de ∡ φ (analisador) sai c/ polariz P_φ (mma. frequência) e intensidade reduzida por 1 fator

$$\begin{cases} = 1 & \text{p/ } \theta = \varphi \\ = 0 & \text{"} \ |\theta-\varphi| = \frac{\pi}{2} \ (\text{polariz. } \perp) \end{cases}$$

(2ª aula - 19-3-85)

Descrição quântica (em termos de fótons)

Dirac: Efeito fotoelétrico c/ luz linearm.te polariz. ⇒ direção preferencial de ejeção de elétrons
∴ cada fóton é polarizado. Onda plana monocrom. = feixe de fótons c/ energia

$$\boxed{E = \hbar\omega \ (= h\nu)} \quad (1.7)$$

(rel. de Einstein) obtida p/ efto fotoeco.

$h = 6{,}62618 \times 10^{-34}$ Js (10^{-27} ergs)

$\hbar = h/2\pi = 1{,}054589$

energia/(unidade área)

Intens. ∝ nº de fótons/(unidade tempo e área) (a frequência ñ muda)

1 fóton após passar pelo polariz. de ∡ θ está, por def., no estado de polarização P_θ (estado quântico). Na exper. c/ o analisador, ele só pode passar ou ñ passar pelo analis.: (não ∃ fração de 1 fóton) os fótons q passam estarão no estado P_φ após a passagem. A redução de intens. (*) I/I_0 dá a % dos fótons q passam. ∴

$$\boxed{\left.\begin{array}{l}\text{A probab. de q 1 fóton preparado no estado } P_\theta \\ \text{atravesse 1 polarizador de ∡ } \varphi, \\ \text{encontrando-se no estado } P_\varphi, \text{ é}\end{array}\right\} \cos^2(\theta-\varphi)} \quad (1.8)$$

Ñ é possível predizer c/ certeza o q acontece c/ cada fóton (exceto p/ $\theta = \varphi$, qdo. a probab. é 1, ou $|\theta-\varphi| \equiv \frac{\pi}{2}$, qdo. é 0)

Analogia c/ reflexão e transmissão parciais: (Newton e os "acessos")

Em geral, só podemos predizer a probab. de passagem.

$$\cos(\theta-\varphi) = \cos\theta\cos\varphi + \operatorname{sen}\theta\operatorname{sen}\varphi = (\cos\theta \quad \operatorname{sen}\theta)\begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \operatorname{sen}\varphi\end{pmatrix} \tag{1.9}$$

= prod. escalar dos "vetores" $(\cos\theta, \operatorname{sen}\theta)$ e $(\cos\varphi, \operatorname{sen}\varphi)$, sugerindo q os estados quânts de polarização P_θ, P_φ do fóton possam ser descritos por esses vetores (só os estados de polarização, sem entrar na descrição espaciotemporal dos fótons: vantagem de tratar de variáveis "internas": + simples).

Álgebra de vetores

Relevância: princípio de superposição: espaço vetorial linear (cf. (1.4))

Vetor coluna de n componentes: $c = \begin{pmatrix}c_1\\ c_2\\ \vdots\\ c_n\end{pmatrix}$

Vetor linha: $(\ldots)$.

Conjugado hermiteano: $c^+ = (c_1^* \; c_2^* \ldots c_n^*)$

Soma: $\begin{pmatrix}a_1\\ \vdots\\ a_n\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}b_1\\ \vdots\\ b_n\end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix}a_1+b_1\\ \vdots\\ a_n+b_n\end{pmatrix}$

Produto por 1 nº (complexo) λ: $\lambda c \equiv \begin{pmatrix}\lambda c_1\\ \vdots\\ \lambda c_n\end{pmatrix}$

Vetor 0: $\begin{pmatrix}0\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}$

Prod. escalar

$$a^+ b \equiv (a_1^* \ldots a_n^*)\begin{pmatrix}b_1\\ \vdots\\ b_n\end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n} a_i^* b_i \tag{1.10}$$

Se $\ell = 0$, a & b são ortogonais

Norma: $\|v\|^2 \equiv v^+ v = \sum_{i=1}^{n} |v_i|^2$ (1.11)

Vetor normalizado: $v^+ v = 1$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_{i=1}^{n} |v_i|^2 = 1} \quad (1.12)$$

Estado quântico

1 sistema encontra-se num estado quântico bem definido qdo. foi submetido a 1 observação completa, em q foi obtida a máxima informação possível sobre o estado. A mma. definição valeria p/ 1 estado clássico: p/ ex., p/ 1 partícula clássica, 1 observação de sua posição e velocidade (ou momento) define completam.te seu estado

Ex.: Os estados quânticos de polarização linear de fótons $P_\theta, P_\varphi, \ldots$ (tb. $\exists$ estados clássicos de polariz. corresp.), preparados por polariz.

Entretanto, p/ 1 feixe de luz clássico no estado P_θ, o comportam.to qdo observamos sua polariz. na direção φ (observ. de P_φ) é bem definido: a intensidade é atenuada pelo fator $\cos^2(\theta-\varphi)$.

Ao contrário, na MQ, p/ 1 fóton no estado quântico P_θ, é impossível predizer o q acontece se observarmos sua polariz. na direção φ (se $\varphi \neq \theta$): o fóton pode passar pelo analisador φ (c/ probabilidade $\cos^2(\theta-\varphi)$) ou não passar (c/ probab. $\operatorname{sen}^2(\theta-\varphi)$), mas a teoria só dá a probab., ñ permitindo predizer o q acontece num evento individual. Da mesma forma, p/ 1 fóton num outro estado $P_{\theta'}$ c/ $\theta' \neq \theta$, os resultados possíveis da interação c/ o analisador φ são os mesmos (passar ou ñ passar), embora c/ probabs. $\neq$s. Logo, o resultado de apenas uma observação individual (passa ou ñ passa por φ) ñ permite distinguir $P_{\theta'}$ de P_θ, ou seja, não mede em q estado quântico o fóton se encontrava; e se prepararmos o fóton no estado P_θ (fazendo-o passar pelo polarizador θ) tb. não podemos em geral predizer o resultado de uma observação futura c/ o analisador φ (exceto p/ $\varphi = \theta$ ou $\theta \pm \frac{\pi}{2}$ ($\theta \pm \pi$)). $\leftarrow |\varphi - \theta| \equiv 0$ ou $\frac{\pi}{2}$ (mod. π).

Justificado, invocando o fóton 1 a 1

O q a MQ PODE fazer é:

1. Uma observação completa O_1 de 1 sist. prepara o sist. num estado quântico bem definido S

2. Uma observação posterior O_2 (q pode ser $\neq O_1$) do sist. preparado no estado S pode geralm.te produzir diversos results. $\neq$s $a_1, a_2, \ldots$, e a MQ ñ permite em geral predizer qual deles aparecerá numa dada observ..

3. Se o sist. é preparado repetidas vezes por O_1, sempre no mmo. estado S, e depois fazemos nele a observ. O_2, a MQ prediz as probabilidades p_1 de observar a_1, p_2 de observar a_2, ... (c/ $\sum_i p_i = 1$)

Logo, as predições da MQ tem caráter estatístico, mas tto-qto. sabemos por razões intrínsecas (ñ pelas mmas. razões q na termodinâmica; ou seja, por ignorância de "variáveis ocultas" → [ou pela interação c/ o resto do Universo"].

1.3. Regras básicas

Vamos começar tratando os sist. quânts. + simples (como a polariz. do fóton), em q ∃ apenas 1 nº finito de estados quânticos independentes (valores possíveis de resultados de observações). P/ estes sistemas, a 1ª regra da MQ é q 1 estado quântico é representado por 1 vetor ("vetor de estado") de 1 nº finito de componentes complexas, $v \in \mathbb{C}^n$

(Regra I) (vetor de estado)

Estado quântico ← $v = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$ coluna ← vetor de estado

[ou $v^+ = (c_1^* \; c_2^* \ldots c_n^*)$] linha (hermiteano conjugado) (1.13)

com $\sum_{i=1}^{n} |c_i|^2 = 1 = v^+ v$ (normalizado) $= \|v\|^2$

onde geral.ᵗᵉ c_i toma valores complexos ($v \in \mathbb{C}^n$)

Ex.:

A notação ← significa: "é representado por"

$$\boxed{v = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \operatorname{sen}\theta \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad v^+ = (\cos\theta \quad \operatorname{sen}\theta) \quad \text{assoc. a } P_\theta} \qquad (1.14)$$

Suponhamos agora q se faça 1 observação num sist. quânt. representado pelo vetor de estado v. Vamo-nos limitar ao q se pode chamar 1 observação "simples", q só pode ter 2 resultados possíveis: "sim" e "não", e tal q existe um e um só estado quântico S p/ a qual o resultado é sim com certeza (probab. = 1). É natural designar a observação por $O(S)$.

(no sentido teórico, ñ necess.ᵗᵉ experimental!)

Ex.: $O(P_\theta)$ { 1 fóton do qual observamos a polariz. linear na dir. θ só pode dar 2 results: passa (sim) ou não pelo analis. de $\measuredangle\theta$, e só há 1 estado, P_θ, p/ o qual a resp. é sim sempre

Veremos + tarde q observações + complicadas podem ser reduzidas a este caso.

Suponhamos agora q 1 sist. é preparado num estado quântico representado pelo vetor de estado v. Pelo q vimos, a MQ deve predizer a probab. de q 1 observ. simples posterior $\mathcal{O}(S_w)$ dê o resultado "sim" (ou seja, q o sist. seja encontrado no estado S_w nessa observação) Se o estado é S_w, representado pelo vetor de estado w, essa probabilidade é dada por

v e w normalizados! $\|v\|^2=1$ $\|w\|^2=1$

$$\boxed{\left.\begin{array}{l}\text{Probab. de q 1 sist. preparado no}\\ \text{estado } v \text{ seja encontrado no}\\ \text{estado } w \text{ numa observ. "simples"}\\ \text{posterior } \mathcal{O}(S_w) \text{ (} w = \text{estado p/ o qual}\\ \text{o resultado de } \mathcal{O}(S_w) \text{ é "sim")}\end{array}\right\} = \underbrace{|w^+ v|^2}_{\text{Prod. escalar}}} \quad \begin{array}{c}\text{(Regra II)}\\ \text{Interpr.}\\ \text{física}\end{array} \quad (1.15)$$

(nº complexo) (probabilística!)

Esta é a regra básica p/ interpret. física da MQ: dá as predições (probabilísticas!) das observs. q podem ser feitas qdo. sabemos q 1 sist. está num dado estado quântico

Ex.: Qual a probab. de q 1 fóton no estado de polariz. P_θ atravesse 1 analisador de $\measuredangle\ \varphi$ (ou seja, orientado c/ $\measuredangle\ \varphi$)?

O vetor $v = \begin{pmatrix}\cos\theta\\ \operatorname{sen}\theta\end{pmatrix}$ representa P_θ (regra I) $\|v\|^2=1$

O " $w = \begin{pmatrix}\cos\varphi\\ \operatorname{sen}\varphi\end{pmatrix}$ é aquele (único) p/ o qual o resultado de $\mathcal{O}(P_\varphi)$ é "sim" $\|w\|^2=1$

Logo, a probab. desejada é

$$\boxed{\begin{aligned}|w^+ v|^2 &= \left|\underbrace{(\cos\varphi \quad \operatorname{sen}\varphi)}_{w^+}\underbrace{\begin{pmatrix}\cos\theta\\ \operatorname{sen}\theta\end{pmatrix}}_{v}\right|^2 = \left|\underbrace{\cos\varphi\cos\theta + \operatorname{sen}\varphi\operatorname{sen}\theta}_{\cos(\theta-\varphi)}\right|^2\\ &= \cos^2(\theta-\varphi)\end{aligned}} \quad (1.16)$$

Consistência: Em particular, se $v \equiv w$, pela normalização

$|w^+ w|^2 = 1$, confirmando q $P_\varphi \equiv S_w$, estado p/ o qual a observ. $\mathcal{O}(P_\varphi)$ dá "sim".

P/ q a (1.15) represente sempre 1 probabilidade, é preciso q esteja entre 0 e 1, o q decorre da ≠dade de Schwarz:

$$\boxed{0 \leq |w^+ v|^2 \leq \underbrace{(w^+ w)}_{=1}\underbrace{(v^+ v)}_{=1}} \quad (1.17)$$

q pode facilte ser demonstrada:

Probl. 1: Sejam u e v dois vetores fixos normalizados, e α um nº complexo (variável). Prove que

$$\min_{\alpha}\left[(u^+ + \alpha^* v^+)(u + \alpha v)\right] = 1 - |u^+ v|^2,$$

(qdo. α varia) onde o mínimo é atingido para $\alpha = -v^+ u$. Deduza daí que

$$0 \leq |u^+ v|^2 \leq 1 \quad (1.17)$$

Probl. 2: Seja S_k um estado representado pelo vetor

$$S_k \leftarrow \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow k^{\text{ª}} \text{ linha}$$

Mostre que, p/ 1 estado geral

$$S \leftarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_k \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

a probab. de q a observação de S dê "sim" a S_k é $|c_k|^2$. Por esta razão, c_k é chamado de ampl. de probab. de encontrar o sistema no estado S_k.

Dá a interpretação física das componentes do vetor de estado

p/ P_θ, $\begin{cases} S_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \text{corresp. a } \theta = 0 \\ S_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \text{corresp. a } \theta = \pi/2 \end{cases}$

(2 estados de polariz. linear ortogonal servem como base)

Não-unicidade das representações

A representação de 1 estado quântico por 1 vetor está longe de ser unívoca! Há 1 qde. variedade de representações possíveis, q será analisada + tarde de forma + sistemática.

Ex.: Em lugar da (1.14), podemos tomar

$$P_\theta \leftarrow v = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix}, \quad v^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i\theta}, e^{i\theta}\right) \quad (1.18)$$

($\|v\|^2 = 1$)

e por conseguinte

$$P_\varphi \leftarrow w = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\varphi} \\ e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad w^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i\varphi}, e^{i\varphi}\right) \quad (1.18a)$$

o q dá, em lugar da (1.16),

$$|w^+ v|^2 = \left|\frac{1}{2}\left(e^{-i\varphi}, e^{i\varphi}\right)\begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix}\right|^2 = \left|\frac{1}{2}\left[e^{i(\theta-\varphi)} + e^{-i(\theta-\varphi)}\right]\right|^2 = \cos^2(\theta-\varphi) \quad (1.19)$$

ou seja, ñ altera as predições físicas da teoria, correspondendo ∴ a 1 represent. equivalente. Naturalte, 1 vez escolhida uma representação, devemos continuar trabalhando c/ ela.

Fatores de fase arbitrários

O estado representado pelo vetor v é igualte bem representado pelo vetor $ve^{i\delta}$, onde δ = real $\forall$ ($e^{i\delta}$ = fator de fase arbitrário). C/ efeito,

$$\boxed{|w^+ v|^2 = |w^+ v e^{i\delta}|^2 \quad , \quad \forall\, w} \quad (1.20)$$

de modo q nenhuma predição física se altera. ($|e^{i\delta}| = 1$)

2ª aula 13/08/91

Nº de parâmetros reais independentes: 1 vetor de estado como (1.13) tem n componentes complexas $c_1, c_2, \ldots, c_n$, o q corresponde a $2n$ parâmetros reais. Mas temos o vínculo da normalização,

$$\sum_{i=1}^{n} |c_i|^2 = 1 ,$$

(sendo ambos normalizados)

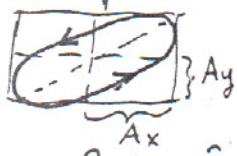
o q $\Rightarrow$ $(2n-1)$ parâms. reais indeps. Por outro lado, como v e $ve^{i\delta}$, c/ δ $\forall$, representam o mmo. estado, 1 desses parâms. pode ser usado p/ especificar δ, o q deixa $(2n-2)$ parâms. reais indeps.

A onda ~~plana~~ emça plana monocromática, + geral possível, tomando $z \parallel \vec{k}$ (pg. 6), é da forma

$$\boxed{\begin{aligned} E_x &= \mathrm{Re}[A_x\, e^{i(\zeta+\varphi_x)}] \\ E_y &= \mathrm{Re}[A_y\, e^{i(\zeta+\varphi_y)}] \end{aligned} \qquad \zeta = kz - \omega t} \quad (1.21)$$

Exercício

onde $A_x^2 + A_y^2$ é proporcional à intens. da onda. A polarização é determinada por (A_y/A_x) e por $\varphi = \varphi_y - \varphi_x$ = ≠ça de fase [podemos fazer p/ ex. $\varphi_x = 0$ por 1 mudança de origem das coords. (z) ou do tpo. (t)]. A polariz. + geral é elíptica



(figs. de Lissajous: compos. de 2 oscils. harmônicas simples em direções ⊥s), e é especificada ∴ por 2 parâmetros reais. Logo, neste caso,

$$2n - 2 = 2 \quad \left\{ \boxed{n = 2} \right. \Rightarrow v = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

∴ Precisamos de 1 vetor c/ 2 compons. complexas p/ descrever o estado geral de polarização

(P/ polariz. linear, $\varphi = 0$ ou π e sobra só 1 parâmetro real)

Luz circular$^{\pm}$ polarizada

1 feixe de " " " é caracterizado pelo fato de q sua intensidade se reduz à metade ao passar por 1 analisador de polariz. linear φ, $\forall\,\varphi$. Em termos de fótons, a probab. de passagem é $\frac{1}{2}$.

Representando o estado de polariz. circular por

$$\boxed{v_{\pm} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}} \quad (1.22)$$

e usando a represent. (1.14•) p/ w assoc. a P_φ, temos então

$$\frac{1}{2} = \left| (\cos\varphi \;\; \operatorname{sen}\varphi) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \right|^2 = |a\cos\varphi + b\operatorname{sen}\varphi|^2$$

$$= (a^*\cos\varphi + b^*\operatorname{sen}\varphi)(a\cos\varphi + b\operatorname{sen}\varphi) \Rightarrow \qquad \tfrac{1}{2}\operatorname{sen}(2\varphi)$$

$$\boxed{\frac{1}{2} = |a|^2 \underbrace{\cos^2\varphi}_{\frac{1}{2}(1+\cos 2\varphi)} + |b|^2 \underbrace{\operatorname{sen}^2\varphi}_{\frac{1}{2}(1-\cos 2\varphi)} + (a^*b + ab^*)\cos\varphi\operatorname{sen}\varphi, \quad \forall\,\varphi} \quad (1.23)$$

$\varphi = 0 \Rightarrow |a|^2 = \frac{1}{2}$; $\left(\varphi = \frac{\pi}{4}\right) a^*b + ab^* = 0$

$\varphi = \frac{\pi}{2} \Rightarrow |b|^2 = \frac{1}{2}$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\alpha}$$
$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\beta}$$

$$e^{i(\beta-\alpha)} + e^{-i(\beta-\alpha)} = 2\cos(\beta-\alpha) = 0$$

$$\therefore \beta \equiv \alpha \pm \frac{\pi}{2} \pmod{2\pi}.$$

$$\therefore \; b = \pm i a$$

o que, escolhendo convenientemente o fator de fase arbitrário ($\alpha = 0$) leva a

$$\boxed{a = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad b = \pm\frac{i}{\sqrt{2}},} \quad (1.24)$$

Interpretação: $|a|^2 = |b|^2 \Rightarrow$ mesma probab. de encontrar os 2 estados de polariz. linear ortog. $\theta = 0$ e $\theta = \frac{\pi}{2}$ ($\hat{x}$, $\hat{y}$)

ou seja,

$$\boxed{v_+^{\bullet} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad v_-^{\bullet} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}} \quad (1.25)$$

($\frac{\hat{x} \pm i\hat{y}}{\sqrt{2}}$)

mostrando q há 2 estados indeps. de polariz. circular (esquerda e direita: ↺ ↻); qual é qual é definido por convenção)

esq. (ótica) dir. (ótica)

Probl. 3. Obtenha os vetores de estado que representam polarizações circulares na representação alternativa (1.18) (a partir da cond. $|w^+ v|^2 = \frac{1}{2}, \forall \varphi$). Interprete o resultado

$v_\theta = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{i\theta} v_+ + e^{-i\theta} v_-\right)$ c/ $\theta = 0, \frac{\pi}{2}$

Resp.: $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

Logo (Probl. 2) a represent. (1.18) usa como base os estados de polariz. circular $v_\pm$

2ª aula: 26-8-92

2ª aula - 16-3

2ª aula 21/3

2. OBSERVÁVEIS

Grandeza observável: pode ser medida. Ex.: polariz. na dir θ; mas o result. n precisa ser "sim" ou "não" em geral, o result. é algum nº, tem de ser real (posição, momento, ...

Rel. d observação "simples": em lugar de perguntar:

Qual o valor da grandeza X?

Podemos perguntar:

"O valor de X é ξ_1?
" " " " " ξ_2?
. . . . . .

} Observ. simples: resp. é "sim" ou "não"

supondo a cada um correspond. a 1 só estado d "sim"

onde $\xi_1, \xi_2, \ldots$ são os results. possíveis da medição de X. Da mma. forma q. estamos-nos limitando por enquanto a sistemas cujo estado é descrito por um nº finito de componentes (vetor $v \in \mathbb{C}^n$), consideraremos tb., por enquanto, observáveis d um nº finito de resultados de medida possíveis (veremos q as 2 coisas estão ligadas). Vamos ver q 1 observável X é representado por 1 matriz

2.1 Revisão de matrizes (Digressão)

Matriz quadrada A $(n \times n) \equiv$ conj. de n^2 elementos (q poderão ser nºs complexos, $\in \mathbb{C}$):

coluna 1 ... coluna n

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \leftarrow \text{linha } 1 \qquad (2.1)$$

Conjugada hermitiana

$$(A^+)_{ij} = A^*_{ji} \qquad (2.2)$$

$A = A^T$ $\quad A = A^+$

$a_{ij} = a^*_{ji}$

ou seja

$$A^+ = \begin{pmatrix} A^*_{11} & A^*_{21} & \cdots & A^*_{n1} \\ A^*_{12} & A^*_{22} & \cdots & A^*_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A^*_{1n} & A^*_{2n} & \cdots & A^*_{nn} \end{pmatrix} \qquad (2.3)$$

$$A = A^+ \equiv A \text{ é } \underline{\text{Hermiteana}} \quad (2.4)$$

Matriz O: $O = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$

Matriz unidade

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} \qquad (1)_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (2.5)$$

Soma de 2 matrizes $n \times n$:

$$(A+B)_{ij} = A_{ij} + B_{ij} \quad (2.6)$$

Produto de 1 matriz por 1 nº complexo λ:

$$(\lambda A)_{ij} = \lambda A_{ij} \quad \left\{ \quad \lambda A = \begin{pmatrix} \lambda A_{11} & \lambda A_{12} & \cdots & \lambda A_{1n} \\ \vdots & & & \vdots \\ \lambda A_{n1} & \cdots & & \lambda A_{nn} \end{pmatrix} \right. \quad (2.7)$$

Produto de 2 matrizes — linhas × colunas → Associativo, distributivo, mas, em geral, não-comutativo!

A, B matrizes $n \times n$

$$(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik} B_{kj} \quad (2.8)$$

= matriz $n \times n$

↓ Matriz como operador linear sobre vetores

A matriz $n \times n$
v = vetor coluna $\in \mathbb{C}^n$

$$(Av)_i = \sum_{k=1}^{n} A_{ik} v_k$$

↑ à direita

= vetor coluna $\in \mathbb{C}^n$ (2.9)

w^+ = vetor linha $\in \mathbb{C}^n$
A matriz $n \times n$

$$(w^+ A)_i = \sum_{k=1}^{n} w_k^* A_{ki}$$

= vetor linha $\in \mathbb{C}^n$ (2.10)

Matriz A = operador linear q transforma vetores $\in \mathbb{C}^n$ em vetores $\in \mathbb{C}^n$

Autovalores e autovetores

Eq. de autovalores:

$$Av = \lambda v \quad (2.11)$$

↑ vetor coluna

v = vetor
λ = nº

$$(w^+ A v)^* = v^+ A^+ w \quad (2.10a)$$

Verifique! (ordem inversa!)

$$\sum_{j=1}^{n} A_{ij} v_j = \lambda v_i \qquad (i=1,2,\ldots,n) \qquad (2.12) \qquad (A-\lambda 1)v = 0$$

ou

$$\begin{pmatrix} A_{11}-\lambda & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22}-\lambda & \cdots & A_{2n} \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn}-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = 0 \qquad (2.13)$$

$v \neq 0$

sist. linear homog. $n \times n$, q só terá sol. $\neq$ da trivial se o determinante secular $= 0$:

$$\Delta(\lambda) \equiv \det \| A_{ij} - \lambda \delta_{ij} \| = 0 \qquad (2.14)$$

Eq. algébrica do grau n em λ = eq. secular (característica). ∴ tem n raízes (geralmente complexas, e q podem ter multiplicidade >1).

Vamo-nos limitar ao caso em q A é hermiteana. Neste caso, todas as raízes são reais:

$$A v = \lambda v \Rightarrow v^+ A v = \lambda v^+ v \Big\} \lambda \text{ real}$$
$$(v^+ A v)^* = v^+ A^+ v = v^+ A v \text{ (real)} \Big\}$$

[$v^+ A v = (\lambda - \lambda^*)\|v\|^2$]

∴ Os autovalores de 1 matriz Hermiteana são reais.

∴ $A v = \lambda v \Rightarrow v^+ A^+ = \boxed{v^+ A = \lambda v^+}$ (2.15)

∴ o vetor v^+ é 1 autovetor linha de A cl o mmo autovalor λ.

Se λ é 1 autovalor, o sist. (2.13) tem 1 sol. $\neq$ trivial, q é definida a menos de 1 fator (sist. homog.); tomaremos cada sol. (autovetor) normalizada a 1.

Suponhamos 1º q as n raízes reais da eq. secular sejam todas $\neq$s: $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$.

Autovetores de 1 matriz hermiteana associados a autovalores $\neq$s são ortogonais.

$$A v_i = \lambda_i v_i \Big\{ v_j^+ A v_i = \lambda_i v_j^+ v_i \ldots \Big\}$$
$$A v_j = \lambda_j v_j \Big\{ v_i^+ A v_j = \lambda_j v_i^+ v_j \Big\} \Rightarrow$$
$$(v_i^+ A v_j)^* \Downarrow = v_j^+ A v_i = \lambda_j^* v_j^+ v_i = \lambda_j v_j^+ v_i$$
$$\Rightarrow (\lambda_i - \lambda_j) v_j^+ v_i = 0 \Big\} \quad \boxed{v_j^+ v_i = 0 \quad (i \neq j)} \quad (2.16)$$
$$\lambda_i \neq \lambda_j \Big\}$$

QED

Chamando de e_i $(i=1,\dots,n)$ os autovetores normalizados, temos então

$$\boxed{e_i^+ e_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & (i\neq j) \\ 1 & (i=j) \end{cases} \quad (i,j)=1,2,\dots,n} \tag{2.17}$$

ou seja, os autovetores neste caso (todos os autovals. $\neq s$) formam uma <u>base ortonormal</u> em $\mathbb{C}^n$ (n vetores l.i. num espaço n-D):

$\forall$ vetor $v \in \mathbb{C}^n$ pode ser escrito como

$$\boxed{v = \sum_{j=1}^{n} v_j e_j} \tag{2.18}$$

onde

$$\boxed{v_i = e_i^+ v \quad (i=1\dots,n)} \tag{2.19}$$ = <u>componentes</u> do vetor v na base $\{e_i\}$

A matriz A, operando sobre $\underline{v}$, se escreve

$$\boxed{\begin{aligned} Av &= \sum_{j=1}^{n} v_j A e_j = \sum_{j=1}^{n} v_j \lambda_j e_j = \\ &= \sum_{j=1}^{n} (e_j^+ v)\lambda_j e_j = \left(\sum_{j=1}^{n} e_j \lambda_j e_j^+\right) v \ , \ \forall v \end{aligned}} \tag{2.20}$$

$n \left\{ \begin{pmatrix} \\ \vdots \\ \\ \end{pmatrix} \times \underbrace{(\cdots)}_{n} = (n\times n) \right.$

de modo q podemos <u>representar</u> A por

$$\boxed{A = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j (e_j e_j^+)} \tag{2.21}$$

<u>Ex.:</u>

$$\boxed{A = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = A^+} \tag{2.22}$$

$$Av = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -iv_2 \\ iv_1 \end{pmatrix} = \lambda v = \begin{pmatrix} \lambda v_1 \\ \lambda v_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \left.\begin{aligned} -\lambda v_1 + i v_2 &= 0 \\ i(\lambda v_2 + i v_1) &= 0 \end{aligned}\right\} \boxed{\Delta(\lambda) = \begin{pmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0} \left\{ \boxed{\lambda_{1,2} = \pm 1} \right. \tag{2.23}$$

$$\lambda_1 = +1 \left\{ \begin{aligned} v_1 &= -iv_2 \\ v_2 &= iv_1 \end{aligned} \right\} \quad v_0 = \begin{pmatrix} c \\ ic \end{pmatrix} \left\{ v^+ v = (c^* \ -ic^*)\begin{pmatrix} c \\ ic \end{pmatrix} = 2|c|^2 = 1 \right.$$

$$\lambda_2 = -1 \left\{ \begin{aligned} v_1 &= iv_2 \\ v_2 &= -iv_1 \end{aligned} \right\} \quad \text{Fator de fase arbitr.} \Rightarrow c = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

∴ podemos tomar

$$\boxed{e_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}, \quad e_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}} \quad (2.23) \qquad (\equiv (1.25))$$

$$e_1^+ e_2 = \frac{1}{2}(1 \ \ -i)\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1-1) = 0 \quad (\text{OK})$$

$$\boxed{\begin{aligned} e_1 e_1^+ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}(1 \ \ -i) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix} \\ e_2 e_2^+ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}(1 \ \ i) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & i\\ -i & 1\end{pmatrix}\end{aligned}} \quad (2.23a)$$

$$\lambda_1 e_1 e_1^+ + \lambda_2 e_2 e_2^+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & i\\ -i & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} = A$$

(OK).

Aplicada a 1 vetor v, a matriz (operador) $e_1 e_1^+$ dá

$$\boxed{(e_1 e_1^+)\, v = (e_1^+ v)\, e_1 = v_1 e_1 = \underline{\text{componente de } v \text{ na "direção" } e_1}} \quad (2.24)$$

de modo que

$$\boxed{\Pi_j = e_j e_j^+ \equiv \underline{\text{operador de projeção na direção de } e_j}} \quad (2.25)$$

No caso do ex. acima,

$$(e_1 e_1^+)\, v = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}c_1 - i c_2\\ i c_1 + c_2\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(c_1 - i c_2)\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$$

$$\left.\begin{aligned} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 - i c_2)\, e_1 \\ v_1 &= e_1^+ v = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \ \ -i)\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_1 - i c_2)\end{aligned}\right\} \underline{\Pi_1 v = v_1 e_1} \quad (\text{OK}).$$

A (2.21) se escreve ∴

$$\boxed{A = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \Pi_j} \quad (2.26)$$

Projetores em "direções" ≠s são ortogonais

Funções de matrizes

$$\left.\begin{aligned} \Pi_j^2 &= e_j \underbrace{e_j^+ e_j}_{=1} e_j^+ = \Pi_j \\ \Pi_j \Pi_k &= e_j \underbrace{e_j^+ e_k}_{=0} e_k^+ = 0 \end{aligned}\right\} \quad \boxed{\begin{aligned} \Pi_j \Pi_k &= 0 \ (j \neq k) \\ \Pi_j^2 &= \Pi_j \end{aligned}} \quad (2.27)$$

$$A^2 = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \Pi_j \sum_{k=1}^{n} \lambda_k \Pi_k = \sum_{j,k=1}^{n} \lambda_j \lambda_k \underbrace{\Pi_j \Pi_k}_{=\delta_{jk}\Pi_j}$$

$$\therefore \boxed{A^2 = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j^2 \Pi_j} \quad (2.28)$$

Analogam.,

$$A^3 = A^2 \cdot A = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j^3 \Pi_j$$

e isto se estende a 1 polinômio, o q nos leva a definir

$$\boxed{f(A) \equiv \sum_{j=1}^{n} f(\lambda_j) \Pi_j} \quad (2.29)$$

pl f = polinômio (estende-se a funções definidas como séries de potências convergentes, como $e^A \equiv \sum_j e^{\lambda_j} \Pi_j$

Ex.: $f(A) = A^0 = \mathbb{1}$ = matriz identidade $\Rightarrow f(\lambda_j) = \lambda_j^0 = 1$

dá

$$\boxed{\mathbb{1} = \sum_{j=1}^{n} \Pi_j = \sum_{j=1}^{n} e_j e_j^\dagger} \quad (2.30)$$

q é chamada de "relação de completeza" ou "resolução da identidade". Note que $\Rightarrow \mathbb{1} v = v = \sum_{j=1}^{n} e_j (e_j^\dagger v) = \sum_{j=1}^{n} v_j e_j$

No ex. da (2.23a), [$\therefore$ exprime q os e_j constituem uma base (completa)]

$$\left.\begin{aligned} e_1 e_1^\dagger &= \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \\ e_2 e_2^\dagger &= \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}\right\} \; e_1 e_1^\dagger + e_2 e_2^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{OK})$$

Se a função f é tal que

$$\boxed{f(\lambda_j) = 0 \;,\; \forall j \Rightarrow f(A) = 0} \quad (2.31)$$

Em particular, isto vale pl $\Delta(\lambda_j)$ (cf. (2.14)). Logo:

$$\boxed{\Delta(A) = 0} \;, \quad (2.32)$$

ou seja, a matriz A satisfaz sua própria eq. secular (característica) (caso particular do teorema de Cayley-Hamilton)

Ex.: Pela (2.23), devemos ter $\boxed{A^2 = \mathbb{1}}$ pl a (2.22)

$$A^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{OK}).$$

O que acontece se a eq. secular tem raízes múltiplas?

$$\Delta(\lambda) = (\lambda_1 - \lambda)^{m_1}(\lambda_2 - \lambda)^{m_2}\cdots(\lambda_p - \lambda)^{m_p} \qquad (2.23)$$
$$m_1 + m_2 + \ldots + m_p = n$$

(pela teoria de sist. de eqs. lins.)

Se $\lambda = \lambda_1$ é 1 autovalor de multiplicidade $m_1 \geq 2$, isto $\Rightarrow$ q $\exists$ m m_1 solução l. i. do sist. de eqs. (2.13) qdo substituímos λ por λ_1; a sol. geral é 1 comb. linear delas [se u e v são ambos autovetores de A cl mmo. autovalor λ_1, o mmo. vale p/ $\forall$ comb. linear $\alpha u + \beta v$

$$\left.\begin{aligned} Au &= \lambda_1 u \\ Av &= \lambda_1 v \end{aligned}\right\} \; A(\alpha u + \beta v) = \lambda_1(\alpha u + \beta v)\Big]$$

Sempre podemos ortonormalizar estas m_1 sols. l. i. (ex.: método de ortonormalização de Schmidt; p/ 3 vets. (u, v, w), p/ ex.: $e_1 = u/\|u\|$; $e_2 = [v - (e_1^+ v)e_1]/\|v - (e_1^+ v)e_1\|$ $(e_1^+ e_2 \equiv 0)$; $e_3 = [w - (e_1^+ w)e_1 - (e_2^+ w)e_2]/\|[\cdots]\|$). Uma vez feito isto, recaímos no caso anterior, cl a base de autovetores

$$(\underbrace{e_1, e_2, \ldots, e_{m_1}}_{\substack{m_1 \text{ autovets.} \\ \text{assocs. a } \lambda_1}}; \underbrace{e_{m_1+1}, \ldots e_{m_1+m_2}}_{\substack{m_2 \text{ autovets.} \\ \text{assocs. a } \lambda_2}}; \ldots\ldots)$$

Neste caso, diz-se q o autovalor λ_1 é degenerado, cl degenerescência m_1; idem p/ λ_j, ...

3ª aula 31/8/92 — 3ª aula - 19/8/92 — 3ª aula - 21-3

2.2 Resultados possíveis de uma medida

Continuaremos restringindo-nos a sistemas quânticos cujos estados são representados por vetores cl nº finito n de componentes.

Seja X uma grandeza física cl $\neq$s valores possíveis $\xi_1, \xi_2, \ldots$ e tal q $\exists$ 1 e 1 só estado quântico e_j p/ o qual X toma o valor ξ_j. Por def., $O(e_j)$ é então 1 observação simples, ou seja, a resp. à pergunta:

É ξ_k o valor de X no estado e_j?

é:

"Sim" p/ $k = j$

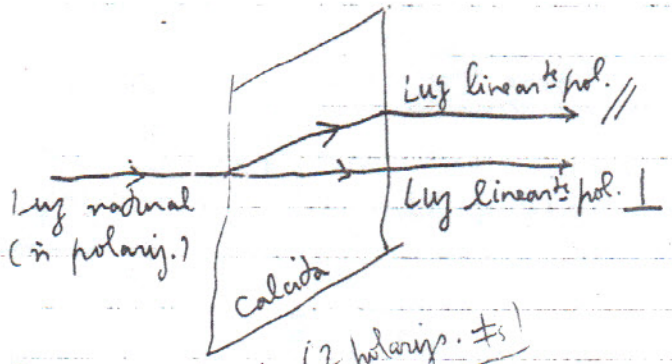
"Não" " $k \neq j$

Logo, pela Regra II, se o sist. é preparado no estado e_j, a probab. de q a medida de X produza o valor ξ_k é

$$|e_k^+ e_j|^2 = \delta_{jk} \qquad (2.24)$$

Logo, c/ escolha conven. dos fatores de fase arbitrs., podemos tomar os estados e_j como 1 conjunto ortonormal de vetores.

Mas 1 conj. ortonormal de vets. em $\mathbb{C}^n$ (dim. n) n pode ter + de n vetores. Logo, n é o nº máximo de ≠s valores possíveis obtidos como results. da medida de 1 grandeza física X nos estados representados pelos vetores v



Ex.: qdo. luz natural (n polariz.) incide sobre 1 cristal birefringente (ex.: calcita), dá origem a 2 ≡ raios refrats. (raio ordin. e raio extraord.), c/ polarizações lineares ortogonais. Nenhum material produz + de 2 feixes refrats. (2 polariz. ≠s!) nessas circunsts., o q é consistente c/ termos tomado $n = 2$ pl descrever o estado quântico de polarização de 1 fóton.

Probl. 4: 1 feixe de luz incide sobre 1 lâmina birefringente, emergindo como 2 feixes //s. Estes incidem sobre outra lâmina birefringente, c/ orientação ≠ da anterior: cada 1 volta a separar-se em 2, de modo q há 4 feixes //s emergindo da 2ª lâmina. Explique por que não há contradição c/ $n = 2$.

Valores médios (ou valores esperados)

Suponhamos q se observe o valor da grandeza X (valores possíveis: $\xi_1, \xi_2, \ldots$) num estado quântico u ∀. Em geral, X n tomará 1 único desses valores (isso só acontece nos estados e_j), mas assumirá ≠s valores em ≠s observs. individuais, e tudo q podemos obter é a probabilidade p_j de que o valor observado seja ξ_j (ex.: valor de P_θ qdo. o fóton é polarizado na dir. θ). Isto quer dizer:

Se fizermos N gde. nº de experiências pl medir X, c/ o sist. sempre preparado no mmo. estado u,

e em n_j dessas experiências o valor observado de X é ξ_j, temos

$$\text{freqüência relativa} = \frac{n_j}{N} \approx p_j \quad \text{p/ } N \text{ suficientemente grande} \tag{2.25}$$

= fração das vezes em que ξ_j ocorre

$$\sum_j n_j = N$$

Como sempre que há 1 distrib. estatística dos resultados, o valor médio (ou esperado) de X na medida é dado pela média ponderada (no estado u)

$$\langle X \rangle_u = \sum_j p_j \xi_j \quad \left(\approx \frac{\sum_j n_j \xi_j}{\sum_j n_j} \right) \tag{2.26}$$

É tb. chamado de valor esperado. Em geral, $\bar{n} \equiv$ cl nenhum dos valores possíveis ξ_j. Esta def. se aplica a ∀ processo estocástico.

Na MQ, as probabs. p_j são dadas pela Regra II. P/ aplicá-la, supomos q todas as observs. $\mathcal{O}_{\xi_j}$ são simples, ou seja, q X toma o nº máximo n de valores possíveis: $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n$. Todos estes valores são então ≠s e, pela (2.24), os estados correspondentes $e_1, e_2, \ldots, e_n$ formam 1 base ortonormal. Pela Regra II,

$$p_j = |e_j^+ u|^2 = u^+ e_j e_j^+ u \tag{2.27}$$

e a (2.26) fica

$$\langle X \rangle_u = \sum_j u^+ e_j \xi_j e_j^+ u = u^+ \left(\sum_j e_j \xi_j e_j^+ \right) u \tag{2.28}$$

o q podemos escrever

$$\langle X \rangle_u = u^+ X u \tag{2.29}$$

(Forma hermiteana assoc. a X e u; em geral, forma quadrática)

onde

$$X \equiv \sum_j \xi_j \Pi_j \,, \quad \Pi_j = e_j e_j^+ \tag{2.30}$$

(4ª aula 26-3)

(quadrática e eixos princs. ↑ diagonaliz.)

é a matriz hermiteana de autovalores ξ_j e autovetores normalizados e_j. Tanto a grandeza física X como a matriz hermiteana X q a representa são chamados de

"o observável X".

Obtemos os seguintes resultados básicos:

1) Uma grandeza observável é representada por 1 matriz hermiteana X (pq os results. da medida devem ser reais)

2) Os resultados possíveis das observs. de X são os autovalores de X (como deveria ser, são sempre reais). (2.31)

3) Os estados p/ os quais X assume c/ certeza seus valores possíveis $\xi_1, \xi_2, \ldots$ são os autovetores de X; diz-se q e_j é o autoestado de X p/ o qual o resultado da medida de X é certamente ξ_j (valor bem definido). $Xe_j = \xi_j e_j$

Estes results. permanecem válidos qdo. o nº de valores assumidos por X ñ é o nº máx. possível n.

4) O valor esperado (médio) de X num estado u é dado pela (2.29).

Isto equivale a dizer q nem todos os autovalores são $\neq$s, ou seja, q há degenerescência. Vimos na pg. 21 q, mmo. neste caso, é possível construir 1 base ortonormal c/ autoestados de X.

Probl. 5: A $\forall$ observação "simples" corresponde 1 observável, c/ os autovalores 1 (= "sim") e 0 (= "não"). Mostre q a matriz (na 1ª represent. p/ P_θ)

$$X = \begin{pmatrix} \cos^2\theta & \cos\theta \operatorname{sen}\theta \\ \sin\theta\cos\theta & \operatorname{sen}^2\theta \end{pmatrix} = P(\theta) \quad (2.31a)$$

[X = "polarização linear do fóton na direção θ"] $= \begin{pmatrix}\cos\theta \\ \operatorname{sen}\theta\end{pmatrix}(\cos\theta \operatorname{sen}\theta) = e_1 e_1^+$ (o outro autovalor é = 0)

representa 1 observ. simples, Mostre q os autoestados correspondentes aos autovalores 1, 0 são (respectivamte) P_θ e $P_{\theta+\frac{\pi}{2}}$. Mostre q o valor esperado de X no estado P_φ é $\cos^2(\theta-\varphi)$. Qual é a interpretação física destes resultados em termos de observações experimentais?

Probl. 6: Repita o Probl. 5 na 2ª represent. p/ P_θ, com a matriz

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & e^{2i\theta} \\ e^{-2i\theta} & 1 \end{pmatrix},$$

mostrando q é 1 observ. "simples", cujo valor esperado p/ o estado P_φ é $\cos^2(\theta-\varphi)$.

Probl. 7. Um operador de projeção (def. geral) é 1 matriz hermitiana cujos autovalores são 0 e 1. Mostre que, identificando 1 = "sim", 0 = "não", toda observ. "simples" é representada por 1 operador de projeção, mas a recíproca n é verdadeira (sugestão p/ isto: um oper. de projeção cujo autovalor 1 é degenerado n representa 1 observ. "simples").

O princípio de correspondência

Quais as grandezas observáveis importantes na MQ? À 1ª vista, n é fácil responder, tratando-se de objetos atômicos, mas é neste pto. q o princípio de correspondência (Bohr, 1913) pode nos ajudar: os objetos macroscópicos são agregados de partículas atômicas, e são descritos c/ mto boa aprox. pela física clássica. Logo, no limite macroscópico, a física clássica deve ser obtida como boa aprox. dos fenômenos descritos pela MQ.

Certas grandezas físicas são aditivas p/ 1 sistema de partículas, ou seja, seu valor p/ o sistema como um todo é a resultante (Σ) dos valores p/ cada 1 das partículas. Ex.: momento linear, momento angular, (energia total p/ partíc. sem interação). A "posição do sistema" definida pelo CM, é 1 comb. linear dos vetores de posição das partículas.

Usando estas grandezas aditivas, podemos estender propriedades e definições de grandezas macroscópicas da física clássica à física quântica, c/ o auxílio do princípio de correspondência.

Vamos usar este método p/ tentar definir o observável quântico assoc. ao momento angular p/ 1 fóton. Na física clássica, já se sabia q um feixe de luz transporta n só energia, mas também momento, q pode ser transferido a 1 corpo, exercendo sobre ele a

desvio das órbitas de satélites artifs.; "velas" solares

pressão de radiação (ex.: desvio das caudas dos cometas ao se aproximar do sol), e tb. se sabia q luz circularte polarizada transporta momento angular, q tb. pode produzir efeitos macroscópicos. P/ ex. (R.A. Beth, 1936): fazendo luz circularte polarizada passar por 1 lâmina de 1 cristal birefringente, que altera seu estado de polarização, a lâmina gira em torno da dir. de propag. da onda e o mom. ∡r transferido pode ser medido.

atuando por absorção e difusão

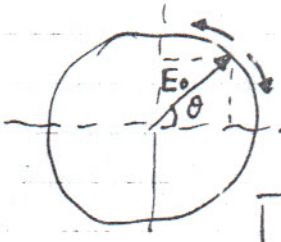
Momento angular do fóton

Vamos considerar uma onda emca plana monocrom. (freq. ∡r ω), propagando-se na direção z, circularte polarizada, q ~~é absorvida por 1 lâmina~~ incide ⊥te sobre 1 lâmina de material absorvente, como na exper. de Beth.

Na descrição da teoria clássica da dispersão (Lorentz) os elétrons atômicos ~~[illegible]~~ sofrem pequenas perturbações do equilíbrio devido ao cpo. elétrico da onda e por isso se comportam como osciladores harmônicos de massa m, frequência ∡r própria ω_0 e constante de amortecto γ, cujas eqs. de movto são ∴ ($\vec{E}$ só tem componentes x e y):

sai colocados em oscilação forçada de freq. ω

$$\boxed{\begin{cases} \ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = \dfrac{e}{m} E_x \\ \ddot{y} + \gamma\dot{y} + \omega_0^2 y = \dfrac{e}{m} E_y \end{cases}} \quad (2.31)$$



Onda circularte polariz.: $\boxed{\begin{cases} E_x = E_0 \cos\varphi \\ E_y = E_0 \operatorname{sen}\varphi \end{cases} \quad \varphi = \varphi_0 \pm \omega t}$ (2.32)

$+kz$ $(z=0)$

direita ou esq.

Podemos tomar $\varphi_0 = 0$ e basta ver o sinal + (direita)

$$\boxed{\begin{aligned} \ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x &= a\cos\omega t \\ \ddot{y} + \gamma\dot{y} + \omega_0^2 y &= \pm a \operatorname{sen}\omega t \end{aligned}} \quad (2.33)$$

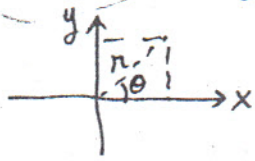
$a = eE_0/m$

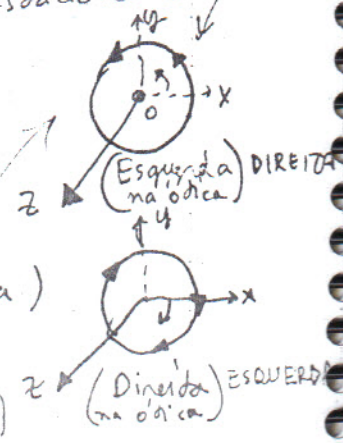
Oscil. forçadas

Queremos a sol. estacionária

Maneira + simples de resolver.

$$\boxed{z = x + iy = re^{i\theta}} \quad (2.34)$$





$$\boxed{\ddot{z} + \gamma\dot{z} + \omega_0^2 z = a e^{i\omega t}} \quad (2.35)$$

$$\boxed{z = z_0 e^{i\omega t} \qquad z_0 = re^{-i\delta}}$$

$$\boxed{\theta = \omega t - \delta} \quad (2.36) \quad \text{(oscil. forçada)}$$

Nomenclatura tradicional da ótica (contrária à lógica e a conv. usual p/ prod. vetorial)

$$\Rightarrow (\omega_0^2 + i\gamma\omega - \omega^2)\, r\, e^{i(\omega t - \delta)} = a\, e^{i\omega t}$$

$$\therefore \boxed{r e^{-i\delta} = \frac{a}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega} = \frac{eE_0/m}{(\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega)}} \quad (2.37)$$

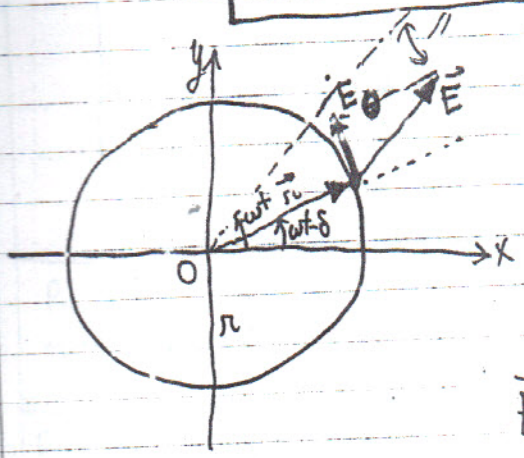
$\delta \neq 0$ devido à absorção γ (ou π)

o q dá

$$\boxed{\begin{aligned} x &= r\cos(\omega t - \delta) \\ y &= r\,\mathrm{sen}(\omega t - \delta) \end{aligned}} \quad (2.38)$$

Defasagem δ c/ o cpo.

Movto circular uniforme sob a ação da onda



Energia transferida pelo campo eco por unidade de tempo $= \vec{F}\cdot\vec{v} =$ potência:

$$\boxed{\frac{dW}{dt} = \vec{F}\cdot\vec{v}} \quad (2.39)$$

$= \vec{F}\cdot\frac{d\vec{r}}{dt}$

veloc. do elétron

$$\vec{F} = e\left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c}\times\vec{B}\right) \quad \left\{ \boxed{\vec{F}\cdot\vec{v} = e\vec{E}\cdot\vec{v}} \right. \quad (2.40)$$

pq $\left(\frac{\vec{v}}{c}\times\vec{B}\right)\cdot\vec{v} = 0$

$$\boxed{\vec{v} = v_\theta\,\hat{\theta}\,, \quad v_\theta = \omega r} \quad (2.41)$$

$E' \neq 0$ porque $\delta \neq 0$ (absorção) ou π

$$\therefore \boxed{\frac{dW}{dt} = eE_\theta\cdot\omega r} \quad (2.42)$$

(Seria $-\omega$ se fosse luz circ. polar. direita)

Mas

$$\boxed{r\cdot eE_\theta = \tau_z} \quad (2.43)$$

$(\vec{r}\times\vec{F} = \vec{\tau} = \tau_z\hat{z}) =$ torque

e, pela dinâmica das rots.,

$$\boxed{\tau_z = \frac{dJ_z}{dt}} \quad (2.44)$$

onde J_z é o momento angular do elétron em rotação em torno do eixo z. Logo, a (2.42) dá

$$\boxed{\frac{dW}{dt} = \pm\omega\,\frac{dJ_z}{dt}} \quad (2.45)$$

$+$ esq.
$-$ direita

q é 1 relação puramte clássica. Vamos agora interpretá-la em termos de fótons, aplicando o princ. de correspondência.

MEC/FENAME Preço ver rapel.

[redacted] O feixe incid. é composto [redacted] (no limite clássico) de 1 gde. nº de fótons de energia $\hbar\omega = E$ ← rel. de Einstein (en. de 1 fóton)

$$\frac{dW}{dt} = \underbrace{\hbar\omega}_{E} \frac{dN}{dt} \qquad (2.46)$$

dN/dt = nº de fótons absorvidos pelo material por un. de tempo.
Se admitirmos q cada fóton circular^te polar. tem mom. ∡r J_z,

$$\frac{dJ_z}{dt} = J_z \frac{dN}{dt} \qquad (2.47)$$

e as (2.45) a (2.47) dão

$$\hbar\omega \frac{dN}{dt} = \pm \omega J_z \frac{dN}{dt} \qquad (2.48)$$

o q dá

$$J_z = \pm\hbar \begin{cases} +\hbar & \text{p/ pol. circ. direita} \\ -\hbar & \text{" " esquerda} \end{cases} \qquad (2.49)$$

(direita: helic. +1; esq. na ótica (M…) — esquerda: helic. −1; dir. na ótica)

(o princ. de corresp. daria esses valores pelo menos p/ o mom. ∡r médio transportado por cada fóton). ← 1 dos postulados de Bohr na velha teoria quântica

Temos ∴ quantiz. do mom. ∡r em unidades de $\hbar$. [redacted] [C/ $J_z = \hbar S_z$, S_z é a componente do "spin" do fóton na dir. de propagação (helicidade), q toma os valores ±1, o q está relac. c/ ser o fóton 1 partíc. de spin 1 (veremos + tarde a descr. do spin); p/ massa de repouso ≠ 0, os valores possíveis seriam (+1, 0, −1), mas p/ massa de repouso 0 só ±1 são possíveis.]

Logo, os autovalores do observável J_z são $\lambda_1 = +\hbar$ e $\lambda_2 = -\hbar$. (2.50) Os autoestados normaliz. corresps., na representação $P_\theta \leftarrow \begin{pmatrix}\cos\theta \\ \sin\theta\end{pmatrix}$, são dados pela (1.25):

$$c_+ \leftarrow e_1 = v_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}, \quad e_2 = v_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix} \qquad (2.51)$$

(e_1: e_+; $c_- \leftarrow e_-$)

Podemos ∴ construir a matriz $X = J_z$ assoc. ao observável "mom. ∡r do fóton", q é dada pela (2.30)

$$\Pi_1 = e_1 e_1^+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}(1 \;\; -i) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix}$$

$$\Pi_2 = e_2 e_2^+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}(1 \;\; i) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & i\\ -i & 1\end{pmatrix} \qquad (2.52)$$

e

$$X = J_z = \sum_j \xi_j \Pi_j = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & i\\ -i & 1\end{pmatrix} \qquad (2.53)$$

$$\Rightarrow J_z = \hbar\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} = \hbar A \;[\text{cf. (2.22)}]$$

↑ observável mom. ⊄r do fóton

Probl. 8. Calcule o valor esperado do mom. ⊄r do fóton num feixe de luz linearmte polarizado.

Probl. 9. Mostre que, dados os resultados:

$$\langle J_z\rangle_{P_\theta} = 0 \;, \quad \langle J_z\rangle_{C_\pm} = \pm\hbar \qquad (2.54)$$

onde

$$P_\theta \leftarrow \begin{pmatrix}\cos\theta\\ \operatorname{sen}\theta\end{pmatrix}, \quad C_\pm \leftarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm i\end{pmatrix} \qquad (2.55)$$

resulta univocamte $J_z = \hbar\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$. Sugestão: Use a represent. geral p/ J_z como matriz hermiteana, $J_z = \begin{pmatrix}a & c\\ c^* & b\end{pmatrix}$, e determine (a, b, c).

Probl. 10. Obtenha a matriz assoc. a J_z na representação $P_\theta \leftarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{i\theta}\\ e^{-i\theta}\end{pmatrix}$. Sugestão: Use os resultds. do Probl. 3.

Incerteza

(4ª aula - 23-3)

Classicamte, se 1 sist. está num estado bem definido, o resultado de cada observ. é bem definido. O valor médio de mtas observs., d o sist. sempre no mmo. estado, coincide d o valor da grandeza nesse estado. (a menos do erro experimental)

MEC/FENAME - Preço: ver fábrica.

Quanticamente, o mom. ang. do fóton J_z é 1 observável de autovalores $\pm\hbar$, o q significa (pg. 24) q os únicos valores possíveis pl as observs. dêe J_z são $\pm\hbar$. No entanto, pl luz linear ± polarizada (cf. Probl. 8).

$$\boxed{\langle J_z \rangle_{P_\theta} = 0} \quad (2.56)$$

Como interpretar este result.? Se medirmos J_z pl cada fóton num feixe de luz preparado no estado bem definido P_θ, o result. será $+\hbar$ ou $-\hbar$ (results individuais são imprevisíveis), e a (2.56) significa q os 2 resultados têm a mesma probabilidade (cf. (2.26)):

$$\boxed{p(+\hbar) = p(-\hbar) = \frac{1}{2}} \quad (2.57)$$

É fácil verificar isto usando a regra II (cf. (1.15)):

$$\left.\begin{array}{l} P_\theta \leftarrow v = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \operatorname{sen}\theta \end{pmatrix} \\ C_\pm \leftarrow w_\pm = e_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \end{array}\right\} \quad p(\pm\hbar) = |w_\pm v|^2 = \frac{1}{2}\left|(1 \mp i)\begin{pmatrix} \cos\theta \\ \operatorname{sen}\theta \end{pmatrix}\right|^2$$

$$= \frac{1}{2}\underbrace{|\cos\theta \mp i\operatorname{sen}\theta|^2}_{e^{\mp i\theta}} = \frac{1}{2} \quad \text{QED} \quad (2.58)$$

De um modo geral, pl $\forall$ estado bem definido de polariz., as medidas de J_z darão o resultado $\hbar$ cl probab. p e $-\hbar$ cl probab. $(1-p)$, cl valor médio (esperado)

$$\boxed{\langle J_z \rangle = p\hbar - (1-p)\hbar = (2p-1)\hbar} \quad (2.59)$$

q pode ser $\forall$ valor entre $-\hbar$ e $\hbar$ ($0 \le p \le 1$), embora cada observ. dê $+\hbar$ ou $-\hbar$.

Superposição de estados

Os autoestados $e_\pm$ formam 1 base. Logo, deve ser possível escrever o est. de polariz. linear P_θ em termos deles:

$$\boxed{v = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \operatorname{sen}\theta \end{pmatrix} = v_+ e_+ + v_- e_-,} \quad (2.60)$$

onde (cf. (2.19))

$$\left.\begin{array}{l} v_+ = (e_+^+ v) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \; -i)\begin{pmatrix} \cos\theta \\ \operatorname{sen}\theta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\theta - i\operatorname{sen}\theta) = \frac{e^{-i\theta}}{\sqrt{2}} \\ v_- = (e_-^+ v) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 \; i)\begin{pmatrix} \cos\theta \\ \operatorname{sen}\theta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\theta + i\operatorname{sen}\theta) = \frac{e^{+i\theta}}{\sqrt{2}} \end{array}\right| \quad (2.61)$$

ou seja,

$$\boxed{V = \left(\frac{e^{-i\theta}}{\sqrt{2}}\right) e_+ + \left(\frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}}\right) e_-} \quad (2.62)$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{-i\theta} \\ i e^{-i\theta} \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ -i e^{i\theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(e^{i\theta}+e^{-i\theta}) \\ \frac{1}{2i}(e^{i\theta}-e^{-i\theta}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \operatorname{sen}\theta \end{pmatrix}$$

OK

Na represent. em q estes 2 estados são a base,

$$\boxed{e_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad e_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}} \quad (2.63) \quad \text{(cf. probl. 3)}$$

e

$$\boxed{P_\theta \leftarrow V = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} \end{pmatrix}.} \quad (2.64) \equiv \text{represent. } (1.18)$$

Pelo probl. 2, V_+ e V_- são as amplitudes de probab. de encontrar 1 fóton linear^{te} polariz. c/ $\measuredangle\theta$ c/ mom. $\measuredangle r$ $+\hbar$ e $-\hbar$, respectiva^{te}, c/

$$\boxed{|V_+|^2 = |V_-|^2 = \frac{1}{2},} \quad (2.65)$$

c q concorda c/ a (2.58).

Obtemos assim a interpret. física da represent. (2.64): é aquela em q a base é a dos autoestados de J_z (polariz. circ. $\pm$), ao passo q em $P_\theta \leftarrow \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \operatorname{sen}\theta \end{pmatrix}$ a base são os est. de polariz. linear $\perp$: $\theta = 0$ e $\theta = \frac{\pi}{2}$, e $\cos\theta$, $\operatorname{sen}\theta$ são as amplits. de probab. p/ q 1 fóton linear^{te} polariz. na dir. θ passe por 1 analisador c/ $\varphi = 0$, $\varphi = \frac{\pi}{2}$ respectiva^{te} (Probabs.: $\cos^2(\theta-\varphi) = \cos^2\theta$, $\cos^2(\theta-\frac{\pi}{2}) = \operatorname{sen}^2\theta$).

A multiplic. de representações, além da ambiguidade do fator de fase arbitrário, provém da ~~possibil. de~~ liberdade de adotar bases $\neq$s.

A (2.62) representa o estado V como uma superposição dos estados e_+ e e_-, o q é 1 novo conceito típica^{te} quântico. O estado de superposição tem proprs. $\pm$ "intermediárias" entre os 2 estados, no sentido de q as probabs. $p(+\hbar)$ ou $p(-\hbar)$ de q tenha mom. $\measuredangle r$ J_z igual ao de e_+ ou ao de e_- são intermediárias entre as desses estados (ou seja, entre 0 e 1), NÃO de os valores esperados tb. são intermediários

Analogia da exper. de Young: superpos. de ampls. de Pacheb. (Dirac)

que os valores medidos sejam intermediários (os valores medidos só podem ser $+\hbar$ e $-\hbar$!). Isto torna o conceito quântico de superpos. de estados bem ≠ do conc. clássico de superpos. de ondas, p/ ex..

4ª aula - 20/08/91

4ª aula 2/9/92

Dispersão (flutuação)

O único caso em q os results. de 1 medida de X dão 1 resultado certo é aquele em q o estado u é 1 autoestado de X (cf autovalor ξ, digamos). Neste caso, cf efeito:

$$\langle X\rangle_u = u^+ X u = u^+ \xi u = \xi \qquad (2.66) \quad (u^+u=1)$$

($Xu = \xi u$)

ou seja;

$$(X - \langle X\rangle_u)u = 0 \qquad (2.67)$$

$\langle X - \langle X\rangle_u\rangle_u = 0$

Reciprocamente, se vale a (2.67), u é 1 autoestado de X cf autovalor $\langle X\rangle_u$.

Se u não é 1 autoestado de X, medidas individuais de X darão valores ≠s (autovalores de X), cf valor médio $\langle X\rangle_u$, mas cf 1 flutuação (ou dispersão) em torno da média. Uma boa medida dessa flutuação ou incerteza é dada por $(\Delta X)_u$ (incerteza de X no estado u), def. por

∃ flucts. > 0 e < 0

$$(\Delta X)^2_u = \langle (X - \langle X\rangle_u)^2\rangle_u = u^+ (X - \langle X\rangle_u)^2 u \qquad (2.68)$$

$$= u^+ [X^2 - 2X\langle X\rangle_u + \langle X\rangle_u^2] u = \langle X^2\rangle_u - 2(u^+ X u)\langle X\rangle_u + \langle X\rangle_u^2 \underbrace{u^+u}_{=1}$$

($u^+Xu = \langle X\rangle_u$)

$$= \langle X^2\rangle_u - 2\langle X\rangle_u^2 + \langle X\rangle_u^2 = \langle X^2\rangle_u - \langle X\rangle_u^2$$

ou seja,

$$\Delta X_u = \sqrt{\langle X^2\rangle_u - \langle X\rangle_u^2} \qquad (2.69)$$

q corresp. à def. clássica do desvio padrão em estatística. Esta incerteza do result. de medida de X no estado u só se anula p/ autoestados de X.

Prob. 11 : Um fóton no estado P_0 incide sobre um analisador de χ, podendo atravessá-lo (resultado da medida = 1) ou não (resultado = 0). Mostre que a incerteza no resultado é

$$\boxed{\Delta X = \left| \frac{1}{2} \operatorname{sen}[2(\theta - \varphi)] \right|} \quad (2.70)$$

Sugestão: Pelo prob. 5, $X = \begin{pmatrix} \cos^2\varphi & \cos\varphi \operatorname{sen}\varphi \\ \operatorname{sen}\varphi \cos\varphi & \operatorname{sen}^2\varphi \end{pmatrix} = P(\varphi)$ mede a polariz. linear na dir. φ.

5ª aula 28-3

Relação de Incerteza → $A = A^+$, $B = B^+$

Temos, p/ 2 observáveis A e B e 1 vetor de estado u, e λ um nº real $\forall$,

$$\boxed{\begin{aligned} &\langle (A + i\lambda B)(A - i\lambda B) \rangle_u = \\ &= u^+ \underbrace{(A + i\lambda B)}_{(A - i\lambda B)^+} (A - i\lambda B) u = \| (A - i\lambda B) u \|^2 \geq 0 \end{aligned}} \quad (2.72)$$

Desenvolvendo a expressão, obtemos

$$u^+ A^2 u - i\lambda \underbrace{(u^+ ABu - u^+ BAu)}_{u^+(AB - BA)u} + \lambda^2 u^+ B^2 u \geq 0$$

ou seja

$$\boxed{\langle B^2 \rangle_u \lambda^2 - i \langle [A, B] \rangle_u \lambda + \langle A^2 \rangle_u \geq 0 \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}} \quad (2.73)$$

onde

$$\boxed{[A, B] \equiv AB - BA} \quad (2.74)$$

$[A,B]^+ = B^+A^+ - A^+B^+ = BA - AB = [B,A] = -[A,B]$

é o comutador das matrizes A e B (geralmente $\neq 0$!)

P/ q o trinômio de 2º grau (c/ coefs. reais) na variável real λ seja ≥ 0 $\forall \lambda$ é preciso q seu discriminante seja ≤ 0, ou seja

$$\boxed{\left(i \langle [A, B] \rangle_u \right)^2 - 4 \langle A^2 \rangle_u \langle B^2 \rangle_u \leq 0} \quad (2.75)$$

$$\boxed{(i[A,B])^+ = [i(AB - BA)]^+ = [-i(BA - AB)] = i[A,B]} \quad (2.76)$$

Logo, $\langle i[A,B] \rangle_u$ é real

$\{\langle i[A,B] \rangle_u\}^2 = |\langle [A,B] \rangle_u|^2$

o q dá a ≠ dade

$$\boxed{\langle A^2\rangle_u \langle B^2\rangle_u \geq \frac{1}{4}\left|\langle [A,B]\rangle_u\right|^2} \quad (2.77)$$

Seja

$$\boxed{\left.\begin{array}{l} A = X - \langle X\rangle_u \\ B = Y - \langle Y\rangle_u \end{array}\right\} \begin{array}{l} \langle A^2\rangle_u = (\Delta X)^2_u \\ \langle B^2\rangle_u = (\Delta Y)^2_u \end{array}} \quad (2.78)$$

$$[(X-a),(Y-b)] = (X-a)(Y-b) - (Y-b)(X-a)$$
$$= (XY - aY - bX + ab) - (YX - aY - bX + ab)$$

$$\therefore \boxed{[(X-a),(Y-b)] = [X,Y]} \quad (2.79)$$

o q dá, finalte,

$$\boxed{(\Delta X)_u (\Delta Y)_u \geq \frac{1}{2}\left|\langle [X,Y]\rangle_u\right| \quad \forall u} \quad (2.80)$$

q se chama 1 relação de incerteza: se X e Y ñ comutam, não é possível tornar $(\Delta X)_u$ e $(\Delta Y)_u$ simultaneamte tão pequenos qto se queira, ∀ q seja o estado u.

Probl. 12: Obtenha a rel. de incerteza pelo seguinte método alternativo: Ache o valor de λ p/ o qual

$$\varphi(\lambda) = \lambda^2\langle B^2\rangle_u - i\lambda\langle [A,B]\rangle_u + \langle A^2\rangle_u$$

assume seu valor mínimo. Mostre que o mínimo é

$$\left[\langle A^2\rangle_u \langle B^2\rangle_u - \tfrac{1}{4}\left|\langle [A,B]\rangle_u\right|^2\right] / \langle B^2\rangle_u$$

e use a desigualdade $\varphi(\lambda) \geq 0$.

Probl. 13. Para calcular um extremo de uma função $f(\alpha)$ de 1 variável complexa $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$, pode-se usar $\partial f/\partial\alpha_1 = \partial f/\partial\alpha_2 = 0$, ou, o que é equivalente; $\partial f/\partial\alpha = \partial f/\partial\alpha^* = 0$, exprimindo f como função de α e α^* como variáveis independentes.

Considerando o valor mínimo de

$$f(\alpha) = \langle (A + \alpha^* B)(A + \alpha B) \rangle_u \geq 0 \quad (\forall \alpha \text{ complexo}) \qquad (2.81)$$

mostre que $\langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \geq |\langle AB \rangle|^2$ (2.81) e conclua que

$$(\Delta X)_u (\Delta Y)_u \geq |\langle XY \rangle_u - \langle X \rangle_u \langle Y \rangle_u| \qquad (2.82)$$

(Mais restrita, mas menos útil que a (2.80).)

correlação entre X e Y no est. u.

Que acontece c/ a ≠ dade p/ X = Y ?

Incompatibilidade

Como consequência da rel. de incerteza, a MQ tem + uma característica radical ≠ da física clássica: a observação simultânea de +2 grandezas físicas ≠s pode ser incompatível, o q significa impossível em princípio.

Como vimos na p. 24, os results. possíveis das obsers. de 1 observável X são os autovalores ξ_j de X. Logo, se fizermos 1 observ. de X c/ resultado ξ_j, podemos garantir q o sistema, após a observação, está no autoestado correspondente e_j, ou seja, a observ. equivale a preparar o sistema no estado e_j.

Da mesma forma, se fizermos 1 observ. de 1 outro observável Y c/ resultado η_j, o sistema após a observ. tem de estar no autoestado correspondente e'_j de Y. Logo, após 1 observ. simultânea de X e Y, o sist. tem de estar num autoestado simultâneo de X e de Y: $e_j \equiv e'_j$ e

$$X e_j = \xi_j e_j \,, \quad Y e_j = \eta_j e_j \qquad (2.83)$$

Ora, os observáveis X e Y podem não ter autoestados simultâneos (veremos logo um ex.). Neste caso, a observação simultânea de X e Y é incompatível.

Já vimos q os autoestados de X podem ser escolhidos de modo a constituir uma base e_j. Se essa base é comum com Y, ou seja, se vale a (2.83) $\forall j$, temos

$$\left.\begin{aligned} YX e_j &= \xi_j Y e_j = \xi_j \eta_j e_j \\ XY e_j &= \eta_j X e_j = \eta_j \xi_j e_j \end{aligned}\right\} (XY - YX) e_j = 0 \qquad (2.84)$$

Mas $\forall$ vetor v é da forma $v = \sum_j v_j e_j$. Logo, a (2.84) implica

$$XYv = YXv, \quad \forall v \qquad (2.85)$$

ou seja,

$$XY = YX \;\{\; XY - YX = [X,Y] = 0 \qquad (2.86)$$

Vemos ∴ que, se X e Y têm uma base de autovetores em comum, eles comutam.

A recíproca de. é verdadeira. Suponhamos 1º q X é não-degenerado, tendo ∴ uma base de autovetores $(e_1,\dots,e_n)$ associ. a autovalores $\xi_1 \neq \xi_2 \neq \dots \neq \xi_n$, e que valha a (2.86). Temos

$$Xe_j = \xi_j e_j$$

$$\therefore \; X(Ye_j) = YXe_j = \xi_j (Ye_j) \qquad (2.87)$$

(pela comutatividade)

Portanto, Ye_j é 1 autovetor de X com autovalor ξ_j; como ξ_j é não-degenerado, isto só é possível se

$$Ye_j = \eta_j e_j, \qquad (2.88)$$

a matriz de Y no subespaço degenerado de dim g_j associ. a ξ_j é hermiteana e pode ser diagonalizada

ou seja, a base de autovetores é comum a X e Y. Se X fosse degenerado, a (2.87) só permitiria concluir que Ye_j é 1 comb. linear dos (g_j) autovetores l.i. de X associ. ao autovalor ξ_j (g_j = degenerescência desse autovalor), mas, de forma análoga ao q foi visto no método de ortonormalização de Schmidt, pode-se mostrar q é possível escolher esses autovetores l.i. de forma q constituam 1 conj. ortonormal de autovetores simultâneos de X e Y.

∴, a cond. nec. e suf. p/ q X e Y tenham uma base ortonormal comum de autovetores, isto é q sejam simultaneamente mensuráveis, é q X e Y comutem (compatibilidade ≡ comutabilidade)

comutatividade

Ex.: Sejam

$$X = P\left(\tfrac{\pi}{4}\right) = \text{observável de polariz. linear na dir } \tfrac{\pi}{4}$$

$$Y = P\left(\tfrac{\pi}{2}\right) = \text{observável de polariz. linear na dir } \tfrac{\pi}{2} \qquad (2.89)$$

$$(2.131a)\quad P(\theta) = \begin{pmatrix} \cos^2\theta & \cos\theta \operatorname{sen}\theta \\ \operatorname{sen}\theta\cos\theta & \operatorname{sen}^2\theta \end{pmatrix}$$

2 observáveis comutam comportam-se como se fossem um único observável

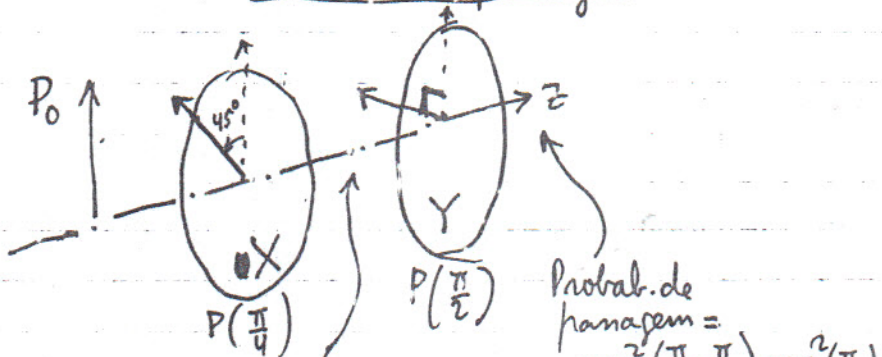
$$P\left(\frac{\pi}{4}\right) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \qquad P\left(\frac{\pi}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.90)$$

$$XY = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$YX = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[X,Y] \neq 0 \qquad = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

P/ verificar a incompatibil. das 2 observs. simultâneas, consideremos 1 fóton incidente de polariz. linear $\theta = 0$ e os 2 analisadores de $\varphi = \frac{\pi}{4}$ e $\varphi = \frac{\pi}{2}$. A não comutabilidade já implica q o result. da passagem pelos 2 analisadores depende da ordem de passagem:

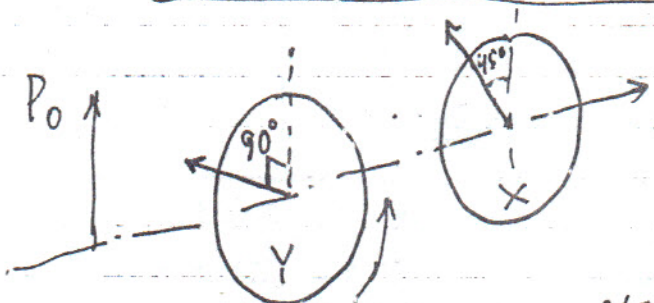


Probab. de passagem = $\cos^2\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{2}$

Probab. de passagem = $\cos^2\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) = \cos^2\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{2}$

Após n, estado $\leftarrow P_{\frac{\pi}{4}}$

Probab. de passagem 1º por X, depois por Y $= \frac{1}{2} \times \frac{1}{2} = \frac{1}{4}$



Probab. de passagem $= \cos^2\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0$

$\therefore$ Probab. de passagem 1º por Y, depois por X $= 0$

Como a probab. de passagem depende da ordem, não tem sentido procurar 1 andrestado simultâneo de $P\left(\frac{\pi}{4}\right)$ e $P\left(\frac{\pi}{2}\right)$, ou seja, 1 fóton não pode estar simultaneamente c/ valores bem definidos da polariz. linear em $\varphi = \frac{\pi}{4}$ e em $\varphi = \frac{\pi}{2}$.

MEC/FENAME - Projeto Rondon

38 Este resultado + a (2.80) mostra que, se $[X,Y] \neq 0$, a medida simultânea de X e Y é incompatível e o produto de suas incertezas é limitado pelo valor esperado do comutador, o q dá 1 idéia do significado físico do comutador.

O mmo vale p/ ~~[illegible]~~ ou a > ia dos pares de ∡s.

Probl. 14. Mostre que

$$\boxed{[P(\theta), P(\varphi)] = 0 \text{ se e somente se } (\theta - \varphi) = n\frac{\pi}{2} \ (n \text{ inteiro})} \quad (2.91)$$

Discuta a interpretação física deste resultado.

(5ª aula - 28-3)

3. EQS. DE [redacted] EVOLUÇÃO

(movimento).

[redacted] O q vimos até agora:

Como representar { O estado de 1 sist. quântico (vetor de estado)
Grandezas observáveis p/ " " (matrizes)

Em geral, o estado de 1 sist. evolui c/ o tpo.. A evolução obedece a eqs. de movimento ou de evolução, q na Mec. Cláss. são as leis de Newton. Procuramos agora o análogo dessas leis na MQ.

3.1 A Eq. de Schrödinger

A derivada em rel. ao tempo de 1 vetor de estado u é definida por

$$\boxed{\dot{u} \equiv \frac{du}{dt} = \frac{d}{dt}\underbrace{\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \cdots \\ \text{[redacted]} \end{pmatrix}}_{u} = \begin{pmatrix} dc_1/dt \\ dc_2/dt \\ \cdots \end{pmatrix}} \quad (3.1)$$

ou seja, obtém-se derivando componente a componente

A eq. fundamental da MQ, q descreve a evolução temporal de 1 sist. quântico, é a eq. de Schrödinger

$$\boxed{i\hbar \frac{du}{dt} = H u} \quad (3.2) \qquad \text{Regra III} \quad (3.2)$$

onde $\boxed{H = H^+}$ é uma matriz hermiteana, q se chama a Hamiltoniana do sistema, q é ∴ 1 observável

veremos logo por que

$[\hbar] = [Ht] = [\text{ação}] = [E] \times [T]$
(energia)

∴ H tem dimensões de energia. Veremos depois q H corresponde real.te à energia do sistema. A Hamiltoniana de 1 sist. caracteriza ∴ completa.te sua evolução temporal. O nome de "Hamiltoniana" vem de sua rel. c/ a Hamiltoniana da Mec. Analítica clássica, q será mencionada + adiante.

A eq. de Schrödinger é 1 postulado básico da MQ, q n pode ser "deduzido", da mma forma q n é possível "deduzir" as leis de Newton da dinâmica. Entretanto, ela tem de satisfazer ao princípio de correspondência, ou seja, a Mec. Class. deve ser 1 caso limite da MQ, e isto permite dar argumentos heurísticos p/ tornar plausível a forma da eq., conforme veremos + adiante. (Schrödinger, como de Broglie, usou a analogia ótica-mecânica desenvolvida por Hamilton; Dirac enfatizou a correspond. c/ a formul. Hamiltoniana e em termos dos parênteses de Poisson).

Observs. gerais sobre a eq. de Schröd.

(a) A eq. é de 1ª ordem no tempo → ∴ o probl. de valores iniciais é:

Dado $u_0 = u(t_0)$ ⟶ determinar $u(t)$

ou seja, basta conhecer o vetor de estado inicial: n é preciso dar sua derivada em rel. ao tpo. $\partial u/\partial t\,(t_0)$, o q é consistente c/ dizermos q o u caracteriza completa.te o estado do sistema quântico.

(b) Como H é indep.te de u, a (3.2) equivale a 1 sist. de eqs. diferenciais lineares p/ as componentes de u. A linearidade leva ao princípio de superposição:

Se $u_1(t)$ e $u_2(t)$ são as sols. corresps. às condrs. iniciais u_{10} e u_{20},

$$u(t) = \lambda_1 u_1(t) + \lambda_2 u_2(t) \qquad (3.2)$$

$$(\forall \lambda_1, \forall \lambda_2) \in \mathbb{C}$$

é sol. da eq. de Schröd. (n - normalizada, mas p/ normaliz. basta tomar $u/\|u\|$) corresp.te à cond. inicial $\lambda_1 u_{10} + \lambda_2 u_{20}$. A (3.2) é 1 superposição dos estados u_1 e u_2.

(c) Conservação da probabilidade

A normalização dos vetores de estado $\|v\|^2 = v^+ v = 1$ é cond. essencial p/ a interpret. física da MQ, pq, como vimos, se $v = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$, os coefs. c_j são amplits. de probab. (Probl. 2) e é preciso q $\sum |c_j|^2 = 1$ (pela regra II, $v^+ v$ é a probab. de persistência do estado v nele próprio, q tem de ser $= 1$).

Logo, é fundamental q a evolução temporal preserve a normalização, ou seja, deve ser, $\forall u$,

$$\boxed{\frac{d}{dt}(u^+ u) = 0} \quad (3.3)$$

o q dá

$$u^+ \frac{du}{dt} + \frac{du^+}{dt} u = 0$$

$$(3.2)\left\{ \frac{du}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H u \right.$$
$$\therefore \frac{du^+}{dt} = +\frac{i}{\hbar} u^+ H^+$$
$$\left.\right\} u^+ \frac{du}{dt} + \frac{du^+}{dt} u = -\frac{i}{\hbar} u^+ H u + \frac{i}{\hbar} u^+ H^+ u$$

$\therefore$

$$\boxed{\frac{d}{dt}(u^+ u) = \frac{i}{\hbar} u^+ (H^+ - H) u = \frac{i}{\hbar} \langle H^+ - H \rangle_u} \quad (3.4)$$

e a conserv. da probab. (3.3) equivale à cond. ($\forall u$)

$$\boxed{H = H^+} \quad (3.5),$$

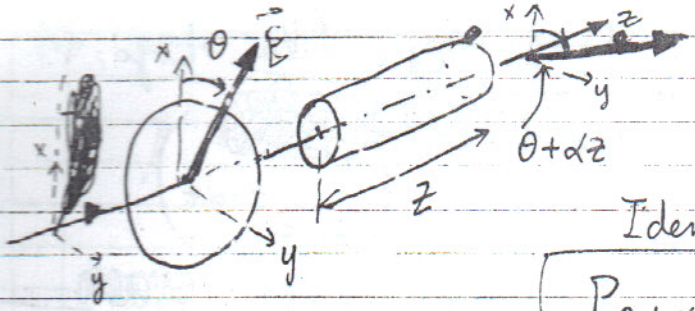
da hermiticidade de H.

3.2 Atividade ótica

"plano de vibração": contém a dir. de oscil. de $\vec{E}$ e a dir. de propag. $\hat{u}$. Plano de polar. $= \perp (\vec{B}, \hat{u})$

Antes de dar um ex. da eq. de Schröd., vamos considerar um ex. análogo c/ a polarização em q a evolução ñ é no tempo, mas no espaço, c/ a propagação da polarização dentro de 1 meio material.

$\exists$ m subst. q são oticamente ativas, no interior das quais luz linearte polarizada se propaga girando o plano de polarização à medida q a luz penetra no interior do meio. Ex.: cristais como o quartzo; A sol. de água c/ açúcar (dextrose → açúcar de cana = dextrorrotatório; seres vivos só metabolizam este tipo → diabetes. p/ outras substs. orgânicas → uso em sacarímetros → o ∡ de rot. é ∝ à concentração da sol.)



6ª aula - 02.04 — 4.1

Vetor de estado de polariz. de 1 fóton q entra: $P_\theta \leftarrow \begin{pmatrix}\cos\theta\\ \operatorname{sen}\theta\end{pmatrix} = u_0$ $= v_0$

Idem após atravessar 1 espessura z do meio: (3.6)

$$\boxed{P_{\theta+\alpha z} \leftarrow u(z) = \begin{pmatrix}\cos(\theta+\alpha z)\\ \operatorname{sen}(\theta+\alpha z)\end{pmatrix}} \quad (3.7)$$

$\alpha \rightarrow$ poder rotatório do meio (>0: dextróg.; <0: levógiro)

o q podemos consider como 1 evolução em z

$$i\frac{du}{dz} = i\alpha\begin{pmatrix}-\operatorname{sen}(\theta+\alpha z)\\ \cos(\theta+\alpha z)\end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix}a & c\\ c^* & b\end{pmatrix}}_{K} u = \begin{pmatrix}a & c\\ c^* & b\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos(\theta+\alpha z)\\ \operatorname{sen}(\theta+\alpha z)\end{pmatrix}$$

K = matriz hermiteana geral (a, b, c = incógnitas)

Preserva a normaliz. do estado na evol. em z (3.8)

$\Downarrow$

$$\left.\begin{aligned} -i\alpha\operatorname{sen}(\theta+\alpha z) &= a\cos(\theta+\alpha z) + c\operatorname{sen}(\theta+\alpha z)\\ i\alpha\cos(\theta+\alpha z) &= c^*\cos(\theta+\alpha z) + b\operatorname{sen}(\theta+\alpha z)\end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} a &= b = 0\\ c &= -i\alpha\end{aligned}$$

Comparando c/ (2.53), vemos que

$$\boxed{i\frac{du}{dz} = Ku = \frac{\alpha}{\hbar}J_z u, \quad K = \begin{pmatrix}0 & -i\alpha\\ i\alpha & 0\end{pmatrix}} \quad (3.9) \qquad \boxed{K = \frac{\alpha}{\hbar}J_z}$$

característica do meio

5ª aula - 9/9/92

q é a eq. de "evolução em z" de $\forall$ vetor de estado de polariz. de 1 fóton num meio. ótica^{te} ativo (descrição completa da propagação da polariz. no meio).

Podemos agora usar esta eq. p/ predizer o q acontece c/ $\forall$ outro estado de polariz. ao se propagar no meio. Ex.: polariz. circular

$$\boxed{u(0) = C_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm i\end{pmatrix}} \quad (3.10)$$

autoestados de J_z c/ autov. $\pm\hbar$

$$KC_\pm = \pm\alpha C_\pm$$

Probl. 15. Mostre que, p/ $u(0) = \begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}$ ($\forall c_1, c_2 \in \mathbb{C}$), a sol. da (3.9) é

$$\boxed{u(z) = \begin{pmatrix}c_1\cos(\alpha z) - c_2\operatorname{sen}(\alpha z)\\ c_1\operatorname{sen}(\alpha z) + c_2\cos(\alpha z)\end{pmatrix}} \quad (3.11)$$

sist. de 2 eqs ±ais lineares de 1ª ordem

42 No caso partic. da (3.10), é $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $c_2 = \pm\frac{i}{\sqrt{2}}$. Logo,

$$u(z) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \cos\alpha z \mp i\,\mathrm{sen}\,\alpha z \\ \underbrace{\mathrm{sen}\,\alpha z \pm i\cos\alpha z}_{\pm i(\cos\alpha z \mp i\,\mathrm{sen}\,\alpha z)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{\mp i\alpha z} \\ \pm i e^{\mp i\alpha z} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{e^{\mp i\alpha z}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \quad \left\{ \boxed{u(z) = e^{\mp i\alpha z}\, u(0)} \right. \quad (3.12)$$

fator de fase

$i\frac{du}{dz} = \pm\alpha = K$

autoestados de K

ou seja, 1 estado de polariz. circular não se altera (continua c/ a mma polariz.) ao atravessar um meio oticamte ativo, o q é confirmado experimentalmte. Entretanto, os fatores de fase p/ estados de polariz. circular oposta são complexos conjugados, de modo q. p/ polariz. linear, q é 1 superposição dos 2 estados $e_\pm$, ocorre a rotação do plano de polariz.

Cl efeito, pela (2.62),

$$P_\theta \leftarrow \boxed{v_\theta = \frac{e^{-i\theta}}{\sqrt{2}} e_+ + \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}} e_- \quad (z=0)} \quad (3.13)$$

Pelo princípio de superpos. (3.2) e pela (3.12),

$$\boxed{v(z) = \frac{e^{-i\theta}}{\sqrt{2}} e^{-i\alpha z} e_+ + \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}} e^{i\alpha z} e_-} \quad (3.13a)$$

$$= \frac{e^{-i(\alpha z+\theta)}}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} + \frac{e^{i(\alpha z+\theta)}}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha z+\theta) \\ \mathrm{sen}(\alpha z+\theta) \end{pmatrix} = v_{\theta+\alpha}$$

o q concorda c/ a (3.7).

Integração da eq. de evolução

Na (3.9), K é uma matriz constante (indepte de z)

Se fosse 1 eq. ≠ al ordin. (ñ p/ vetores e matrizes), poderíamos integrá-la imediatamte:

$$\boxed{u(z) = e^{-iKz}\, u(0)} \quad (3.14)$$

Vimos na (2.29) como definir uma função do tipo e^{cA} p/ 1 matriz A: $(A = \sum \lambda_j \Pi_j)$

$$\boxed{f(A) = \sum_j f(\lambda_j)\,\Pi_j} \quad (3.14)$$

λ_j = autovalores de A

$\Pi_j = e_j e_j^+$

No caso atual, pela (3.12), os autovetores são

$$\boxed{e_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix},\ \lambda_+ = +\alpha \qquad e_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix},\ \lambda_- = -\alpha} \quad (3.15)$$

e a (2.52) dá' $= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{J_z}{\hbar}\right)$ $= \frac{1}{2}\left(1 - \frac{J_z}{\hbar}\right)$

$$\boxed{\Pi_+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix},\ \Pi_- = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & i\\ -i & 1\end{pmatrix}} \quad (3.16)$$

Logo, a (3.14) dá'

$$e^{-iKz} = e^{-iz\lambda_+}\Pi_+ + e^{-iz\lambda_-}\Pi_- = e^{-i\alpha z}\Pi_+ + e^{i\alpha z}\Pi_-$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(e^{-i\alpha z} + e^{i\alpha z}) & \frac{1}{2i}(e^{-i\alpha z} - e^{i\alpha z}) \\ \frac{1}{2i}(e^{i\alpha z} - e^{-i\alpha z}) & \frac{1}{2}(e^{-i\alpha z} + e^{i\alpha z}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha z) & -\operatorname{sen}(\alpha z) \\ \operatorname{sen}(\alpha z) & \cos(\alpha z) \end{pmatrix}$$

ou seja,

$$\boxed{U(z) = e^{-iKz} = \begin{pmatrix} \cos(\alpha z) & -\operatorname{sen}(\alpha z) \\ \operatorname{sen}(\alpha z) & \cos(\alpha z) \end{pmatrix}} \quad (3.17)$$

matriz "operador de evolução espacial".

e, p/

$$\boxed{u(0) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}} \quad (3.18)$$ → Ex. de P_θ

com partic.: $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \operatorname{sen}\theta \end{pmatrix} \mapsto P_\theta$.

a (3.14) dá'

$$\boxed{u(z) = \begin{pmatrix} \cos\alpha z & -\operatorname{sen}\alpha z \\ \operatorname{sen}\alpha z & \cos\alpha z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \overset{\text{fi}}{=} \begin{pmatrix} c_1\cos\alpha z - c_2\operatorname{sen}\alpha z \\ c_1\operatorname{sen}\alpha z + c_2\cos\alpha z \end{pmatrix}}, \quad (3.19)$$

q coincide c/ a (3.11).

Analogamente, se H (Hamiltoniana) é 1 matriz constante (indep. do tempo), a sol. da eq. de Schrödinger é da forma ($H/\hbar$ = análogo de K)

$$\boxed{u(t) = e^{-iHt/\hbar}u(0) = U(t)u(0)} \quad (3.20)$$

onde

$$\boxed{U(t) = e^{-iHt/\hbar}} \quad (3.21)$$

5ª aula - 22-08-91

é o operador de evolução. P/ sistemas (quânticos) c/ 1 nº finito de estados, isto dá em princípio a sol. da eq. de Schrödinger (se soubermos calcular os autovalores e autovetores de H).

Os autovalores e autoestados de H têm 1 papel especialmente importante. São os

3.3. Estados Estacionários

Suponhamos q a Hamiltoniana H seja independente do tempo (veremos depois, como "" representa a energia do sistema, q isto equivale a dizermos 1 sistema conservativo.

Seja v 1 autoestado de H cl autovalor E:

$$\boxed{Hv = Ev} \quad (3.22)$$

(veremos adiante)

Como H representa o observável energia do sist., seus autovalores representam os valores possíveis da energia

Suponhamos q, p/ $t=0$, o sist. esteja no estado v:

$$\boxed{u(0) = v} \quad (3.23)$$

Pela (3.20), devemos esperar que a sol. corresp da eq. de Schröd seja

$$\boxed{u(t) = e^{-iHt/\hbar} v = e^{-iEt/\hbar} v} \quad (3.24)$$

(expandindo $e^{-iHt/\hbar} = \sum \frac{(-iH/\hbar)^n t^n}{n!}$)

Cl efeito, a (3.24) dá

$$\boxed{i\hbar \dot{u} \equiv Eu = Hu} \quad (3.25)$$

QED

(3.25)

A (3.24) mostra que $u(t)$ só difere de $u(0)$ por 1 fator de fase, ou seja, é o mesmo estado quântico: se 1 sist. está num autoestado de H, todos os resultados físicos são independentes do tempo ($|w^+ u(t)|^2 = |w^+ u(0)|^2$). Por isso, os autoestados de H são chamados de estados estacionários. A eq. de autovalores (3.22) define 1 estado estacionário de energia E, e chama-se a eq. de Schrödinger estacionária ou independente do tempo.

Pela (3.24), a frequência angular ω de oscilação assoc. c/ $u(t)$ é dada por

$$e^{-i\omega t} = e^{-iEt/\hbar} \quad \{ \quad \boxed{E = \hbar\omega} \quad (3.26)$$

q é a rel. de Einstein e corrobora a interpret. de E como energia

Note q os estados (autoest. dos estacs.) são o análogo temporal dos estados de polariz. circular p/ o meio ótico ativo; como lá, são mto import. por constituir 1 base em termos da qual podemos expandir a solução geral.

P/ ver isso, suponhamos q H tenha 1 conj. finito de autovalores e autovetores

$$H e_j = E_j e_j \qquad (3.27)$$

onde (pela (3.24))

$$e_j(t) = e_j e^{-iE_j t/\hbar} \qquad (3.28)$$

P/ 1 estado inicial $\forall\, u_0$,

$$u_0 = \sum_j c_j e_j \qquad (3.29) \qquad (c_j = e_j^+ u_0)$$

(cf. (3.13a))

demos pelo princ. de superposição (coefs. do exp.)

$$u(t) = \sum_j c_j e_j e^{-iE_j t/\hbar} \qquad (3.30)$$

← cl efeito, satisfaz a eq. de Schröd. e a cond. inicial

como sol. geral da eq. de Schröd. p/ H indep. do tempo. A (3.30) chama-se expansão em estados estacionários.

A interpret. física dos coefs. de expansão é imediata:

$$|c_j|^2 = \text{probab. de que a medição da energia do sistema dê o resultado } E_j, \qquad (3.31)$$

ou seja, c_j é a ampl. de probab. de q o sistema seja encontrado cl energia E_j.

Eq. do movto p/ valores médios

À medida q o estado quântico $u(t)$ evolui no tempo, o valor esperado de 1 observável X no estado u tb evolui

$$\langle X \rangle_{u(t)} = u^+(t) X u(t) \qquad (3.32)$$

Se o observável X não depende explicitamente do tempo, temos

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle X\rangle_{u(t)} = i\hbar \frac{d}{dt}[u^+(t) X u(t)] =$$

$$= i\hbar \frac{du^+}{dt} X u + i\hbar u^+ X \frac{du}{dt} = -u^+ H X u + u^+ X H u$$

6)

$$\frac{d}{dt}\langle X\rangle_\mu = \frac{1}{i\hbar}\langle [X,H]\rangle_\mu \qquad (3.33)$$

A evolução temporal do valor esperado de X depende do valor esperado do comutador de X com H.

Na formulação Hamiltoniana da Mec. Clássica, se tivermos 1 sist. de partículas descrito pelas variáveis canônicas (momento conjug.) (q_i, p_i) e 1 grandeza física X (observável) assoc. ao sistema (p/ ex., momento angular total) q é função dessas variáveis, mas não depende explicitamente do tempo (só através da evolução temporal do estado do sistema, descrita por $q_i(t), p_i(t)$), teremos

$$\frac{d}{dt}X(\{q_i(t)\},\{p_i(t)\}) = \sum_i \left(\frac{\partial X}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial X}{\partial p_i}\dot{p}_i\right) \qquad (3.34)$$

Mas, pelas eqs. de Hamilton, sendo $H(\{p_i\},\{q_i\})$ a Hamiltoniana do sist.,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad (3.35)$$

de modo q a (3.34) fica

$$\frac{dX}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial X}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial X}{\partial p_i}\right) \equiv \{X,H\} \qquad (3.36)$$

(Colchetes) de Poisson — Mec. Clássica

Comparando a (3.33) c/ a (3.36), somos levados a estabelecer o seguinte paralelo:

$$\underbrace{\frac{[X,H]}{i\hbar}}_{\text{MQ}} \longleftrightarrow \{X,H\}_{\text{Mec. Clássica}} \qquad (3.37)$$

É realmente possível utilizar este paralelo como 1 método heurístico de transpor resultados clássicos p/ a MQ (Dirac), mas não vamos fazer isso sistematicamente. Note q, sendo

$$[X,H] \longleftrightarrow i\hbar\{X,H\},$$

no limite clássico ($\hbar \to 0$) o comutador $\to 0$, ou seja, a

não-comutatividade é 1 efeito característico quântico (observs. incompatíveis). Note q $\{\ \}$ tem propr. algébricas análogas às do comutador; p/ ex.,

$$\{X, H\} = -\{H, X\}. \quad (3.38)$$

Em particular, decorre da (3.33) que, se H é indep^{te} do tempo, $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$

$$\langle H \rangle_\psi = \text{constante} \quad (3.39)$$

q é a versão quântica da conserv. da energia. Mais geral^{te}, observáveis que comutam com H são conservados (em valor esperado).

Em termos da representação de 1 vetor de estado $\forall\ \psi(t)$ pela exp. em ests. estacs. (3.30), temos

$$\langle X \rangle_\psi = \psi^+ X \psi = \left(\sum_j c_j^* e_j^+ e^{iE_j t/\hbar}\right) X \left(\sum_k c_k e_k e^{-iE_k t/\hbar}\right)$$

$$\langle X \rangle_\psi = \sum_{j,k} c_j^* c_k \left(e_j^+ X e_k\right) e^{i(E_j - E_k)t/\hbar} \quad (3.40)$$

Os termos diagonais ($j=k$) são indep. do tpo.; a dependência do tpo. ocorre nos termos oscilatórios, cf frequências ω_{jk}

$$\omega_{jk} = \frac{E_j - E_k}{\hbar} \quad (3.41)$$

Cf isto encerramos a apresent. geral dos princípios básicos da MQ. A restrição + importante da disc. (mas q facilitou grande^{te} a disc. dos princípios) foi a restrição a sistemas quânticos cf 1 nº finito de estados possíveis. Vamos agora levantar essa restrição, considerando nova^{te} o caso + simples possível: o movto de 1 partícula quântica restrito a 1 dimensão.

6ª aula · 30-3

4. PARTÍCULAS QUÂNTICAS EM UMA DIMENSÃO

4.1. Representação do estado de 1 partíc. quânt. 1-D

1 partícula clássica ("ponto material") é 1 sist. q satisfaz aos seguintes requisitos individuais:

(1) É localizada (num pto., se as dimensões da partíc. são desprezíveis) ↑ a cada t

(2) Não pode estar em 2 lugares ≠s ao mesmo tpo.

(3) O movto da partícula é contínuo no tempo (levando à idéia de 1 trajetória → cl pos. e veloc. bem def. a cada t

(4) Obedece às leis de Newton da Mec. Clássica.

Na MQ, o conceito de partícula é tão próximo q/c possível dessas idéias, mas há ≠ças fundamentais. Os ptos. (1) e (2) permanecem ≈te válidos na MQ Não Relativ. (NR). No caso relativístico, já dão + dificulds.: ex. → não se pode localizar 1 fóton dentro de 1 região de dims. < λ. Além disso, ∃ sempre a interpret. probabilística: só podemos falar da probabilidade de encontrar 1 partíc. no entorno de 1 pto., se ela é observada nesse entorno, isto correspondo a preparar 1 estado quântico localizado nele.

O pto. (3) é drasticamte afetado. Como vimos via disc. da exper. de Young, a idéia de 1 trajetória contínua na MQ não deve ser válida; veremos logo q posição e momento (ou veloc.) são observáveis geralmte incompatíveis. A continuidade no tempo pode ser aplicada à idéia da evolução contínua do vetor de estado representativo do sistema, descrita pela eq. de Schröd., mas este vetor de estado, fisicamte, representa amplitudes de probab.. Podemos dizer q as amplitudes de probab. evoluem continuamte no tempo.

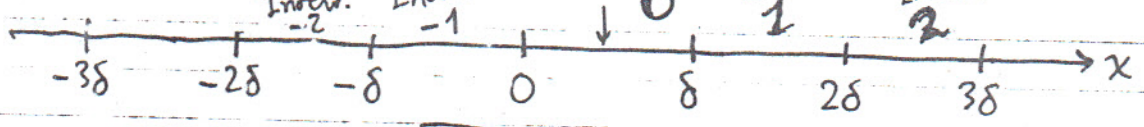
Finalmte, a qto. a (4), as leis de Newton são substituídas pela eq. de Schröd., mas devemos verificar q ∃ 1 "limite clássico" em q elas são obtidas como 1 aprox. pelos valores esperados a partir da eq. de Schröd. Este é o caso NR, ao qual vamo-nos limitar.

A partícula é restrita limitada a mover-se somente ao longo do eixo Ox. Entretanto, uma observação de posição pode encontrá-la em $\forall$ pto. do eixo, ou seja, os valores possíveis do observável "posição da partícula" são

$$\forall x \in \mathbb{R}$$

(infinidade contínua de valores possíveis). Logo, é preciso generalizar o conceito de observáveis e vetores de estado de um n.º finito de valores p/ uma infinidade contínua.

Como 1º passo p/ isso, vamos estabelecer 1 represent. aproximada, dividindo a reta em intervalos de = comprim.to δ:



Intervalo n: $\boxed{n\delta \leq x < (n+1)\delta}$ $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ (4.1)

Observ.: da posição aprox. da partíc. (c/ erro $\leq \delta$) $\equiv$ verificar em q intervalo ela está.

Leva a 1 represent. aproximada do observável posição da partíc. em termos de 1 vetor coluna c/ ∞s componentes

$$\boxed{|u\rangle \longleftarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \\ c_{n+1} \\ \vdots \end{pmatrix}} \quad (4.2)$$

c/ a cond. de normalização

$$\boxed{\langle u|u\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 = 1} \quad (4.3)$$

Implicação: $c_n \to 0$ p/ $n \to \pm\infty$ (série convergente)

e a interpret. física

$$\boxed{|c_n|^2 = \text{probab. de encontrar a partíc. no intervalo } n} \quad (4.4)$$

P/ passar da represent. aprox. à exata, devemos fazer $\delta \to 0$

A probab. é $\propto \delta$

Qdo. $\delta \to 0$, a probab. de encontrar a partíc. num dado intervalo de compr.º $\delta \to 0$ é $\mathcal{O}(\delta)$.

Logo;

$$\frac{|C_{n(\delta)}|^2}{\delta} \xrightarrow[(\delta \to 0)]{} \text{lim finito} = \text{densidade de probab. de encontrar a partíc. em } x \qquad (4.5)$$

($|C_{n(\delta)}|^2$: p/ 1 divisão δ; num entorno de centro em)

onde x é o pto. em torno do qual o intervalo se concentra.

No limite, teremos 1 densidade de probab. $p(x)$, c/

$$p(x)\,dx = \text{probab. de encontrar a partíc. entre } x \text{ e } x+dx$$

$$\text{e} \quad \int_{-\infty}^{\infty} p(x)\,dx = 1 \quad \left(= \lim \sum_n \delta \cdot \left[\frac{|C_{n(\delta)}|^2}{\delta}\right]\right) \qquad (4.6)$$

A amplitude de probabilidade de observar a partíc. em x deve ser

Função de onda

$$\psi(x) = \lim_{\delta \to 0}\left(\frac{C_{n(\delta)}}{\sqrt{\delta}}\right) \qquad (4.7)$$

De fato $\psi(x,t)$; por enquanto, omitimos a depend. de t

x x+δ

$u \leftarrow \psi(x)$

q é em geral complexo, c/

$$|\psi(x)|^2 = p(x) \qquad (4.8)$$

= dens. de probab. em x.

Logo, o estado de 1 partíc. quântica em 1-D deve ser descrito por 1 função de onda $\psi(x)$ c/ valores $\in \mathbb{C}$ e quadraticamente integrável, c/

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\,dx = 1 \qquad (4.9)$$

Note q p/ 1 partíc. clássica basta dar $2n^{\underline{o}}$ $(x, \dot{x})$ (posição e veloc.) em lugar de 1 função

c/

$$|\psi(x)|^2\,dx = \text{probab. de encontrar a partíc. entre } x \text{ e } x+dx \qquad (4.10)$$

7ª aula q-4

q é a interpret. probabilística do M. Born (1926) da função de onda.

O hermiteano conjugado de 1 vetor de estado é

$$\boxed{w = \begin{pmatrix} \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \\ d_{n+1} \\ \vdots \end{pmatrix} \longrightarrow w^+ = \left(\dots d_{n-1}^* \; d_n^* \; d_{n+1}^* \dots \right)} \quad (4.11)$$

c/

$$\boxed{\varphi^*(x) = \lim_{\delta \to 0} \left(\frac{d^*_{n(\delta)}}{\sqrt{\delta}} \right)} \quad (4.12) \equiv$$ Função de onda hermiteana conjug. (= complexa ").

e temos

$$\boxed{\begin{aligned} \underset{(w,u)}{w^+ u} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} d_n^* c_n = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta \cdot \left(\frac{d_n^*}{\sqrt{\delta}} \right) \left(\frac{c_n}{\sqrt{\delta}} \right) \\ &\longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x) \psi(x) \, dx \equiv (\varphi, \psi) \end{aligned}} \quad (4.13)$$

$= (\psi, \varphi)^*$

q representa o produto escalar das funções φ e ψ no espaço das funções quadraticam.te $\int$veis. Em particular,

$$\boxed{\| \psi \|^2 = (\psi, \psi) = 1} \quad (4.14)$$

N.B.: [Martin usa a notação pouco convencional (φ^*, ψ)]

Generalização da regra II:

$$\boxed{\left.\begin{array}{l} \text{Se 1 sist. quânt. é preparado no estado } \psi(x), \\ \text{a probab. de que seja encontrado no estado} \\ \varphi(x) \text{ numa observ. "simples" posterior } O(S_\varphi) \\ (\varphi = \text{único estado p/ o qual o result. de } O \text{ é "sim"}) \end{array}\right\} = |(\varphi, \psi)|^2} \quad (4.15)$$

φ, ψ normalizados

n degenerado

Note que a ≠dade de Schwarz tb. se aplica ao produto escalar de funções

$$\boxed{|(\varphi, \psi)| \leq \| \varphi \| \, \| \psi \|} \quad (4.16)$$

e a dem. é a mesma do Probl. 1, considerando que

$$\boxed{0 \leq \min_{\alpha} \left(\| \varphi + \alpha \psi \|^2 \right) = \| \varphi \|^2 - \frac{|\psi, \varphi|^2}{\| \psi \|^2} \quad \left(\text{atingido p/ } \alpha = -\frac{(\psi, \varphi)}{\| \psi \|^2} \right)} \quad (4.17)$$

$= 1 - |(\psi, \varphi)|^2$ p/ φ e ψ normalizados

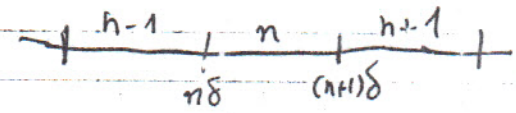
As funções quadraticam.te $\int$veis definem um espaço vetorial c/ m.tas propr.s análogas a $\mathbb{C}^n$, conforme vamos ver ("espaço de Hilbert").

4.2 Eq. de Schrödinger da partíc. livre

Voltando à represent. aproximada, a eq. de Schröd. aprox. deve ser da forma

$$i\hbar \frac{du}{dt} = i\hbar \begin{pmatrix} \vdots \\ \dot{c}_{n-1} \\ \dot{c}_n \\ \dot{c}_{n+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = Hu \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \dot{c}_n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} H_{nm} c_m} \quad (4.18) \qquad \boxed{H_{nm} = H^*_{mn}}$$



Continuidade: a taxa de var. temporal de amplitude de probab. $\dot{c}_n$ de encontrar a partíc. no intervalo n só depende das amplitudes no int. n e nos intervalos imediatamente adjacentes, $(n-1)$ e $(n+1)$:

$$\boxed{i\hbar \dot{c}_n = H_{n,n-1} c_{n-1} + H_{n,n} c_n + H_{n,n+1} c_{n+1}} \quad (4.19)$$

Eq. de ≠ças finitas

o q dá

$$H = \begin{array}{c} \\ (n-1) \\ n \\ (n+1) \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} & (n-1) & n & & \end{array} \\ \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & & 0 \\ \cdots & a & b & & \\ \cdots & b^* & a & b & \\ 0 & & b^* & a & \cdots \\ & & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\left.\begin{aligned} H_{n,n} &= a = a^* \\ H_{n,n+1} &= b \\ H_{n,n-1} &= b^* \end{aligned}\right\} \quad (4.20)$$

Indep. de n

Só a diagonal principal e as 2 //s adjacentes $\neq 0$

Invariância de translação no espaço (reta) livre

Se tomarmos $\boxed{a = \frac{d}{\delta^2}}$ $\boxed{b = -\frac{d}{2\delta^2}}$ (4.21), a (4.19) tem 1 limite simples p/ $\delta \to 0$:

$$\boxed{i\hbar \dot{c}_n = \frac{d}{2\delta^2}\left[2c_n - (c_{n-1} + c_{n+1})\right] = d\,\frac{\frac{(c_n - c_{n-1})}{\delta} - \frac{(c_{n+1} - c_n)}{\delta}}{2\delta}} \quad (4.22)$$

ou, pela (4.7), dividindo por $\sqrt{\delta}$

$$\lim_{\delta\to 0}\left(i\hbar \frac{\dot{c}_n}{\sqrt{\delta}}\right) = i\hbar\, \dot{\psi}(x,t) = -\frac{d}{2} \lim_{\delta\to 0}\left\{ \frac{\left[\frac{\psi(x+\delta,t) - \psi(x,t)}{\delta}\right] - \left[\frac{\psi(x,t) - \psi(x-\delta,t)}{\delta}\right]}{\delta} \right\}$$

$$= -\frac{d}{2}\lim_{\delta\to 0}\left[\frac{\frac{\partial\psi}{\partial x}(x,t) - \frac{\partial\psi}{\partial x}(x-\delta,t)}{\delta}\right] = -\frac{d}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

ou seja,

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{d}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}} \quad (4.23)$$

6ª aula: 14/9/92

Rel. de de Broglie

No caso dos fótons, Einstein havia associado a 1 fóton de freqüência ω e vetor de onda $\vec{k}$, descrito pelo fator de propag. $\exp[i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)]$,

$$\boxed{\text{energia } E = \hbar\omega \;,\quad \text{momento } \vec{p} = \hbar\vec{k}} \quad (4.24)$$

Em 1925, L. de Broglie propôs a idéia de q a $\forall$ partícula estaria ass. associada 1 onda, c/ as mesmas rels. entre $(E, \vec{p})$ e $(\omega, \vec{k})$.

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \;\Rightarrow\; \boxed{\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{mv}} \quad (4.25)$$ Rel. de de Broglie

p/ 1 partíc. de massa m.

P/ 1 partíc. livre de massa m e momento p, em 1-D deveríamos ter então como sol. da (4.23),

$$\boxed{\psi(x,t) = A\,e^{i(kx-\omega t)} = A\,e^{ikx - iEt/\hbar}} \quad (4.26)$$

$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -k^2\psi$

o q dá

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi = -\frac{d}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = +k^2\frac{d}{2}\psi} \quad (4.27)$$

~~q.d.~~ ou seja,

$$\boxed{E = \frac{1}{2}dk^2 = d\frac{p^2}{2\hbar^2}} \quad (4.28)$$

pela rel. de de Broglie.

Mas, p/ 1 partíc. livre (NR) de momento p e massa m temos a rel. clássica

$$\boxed{E = \frac{p^2}{2m} \quad \left(= \frac{1}{2}mv^2\right)} \quad (4.29)$$

q esperamos deva permanecer válida p/ os valores esperados (princ. de corresp.)

Comparando a (4.28) c/ a (4.29), obtemos

$$\boxed{d = \frac{\hbar^2}{m}}, \quad (4.30)$$

e a (4.23) fica, finalmente,

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}} \quad (4.31)$$

q é a eq. de Schröd. p/ 1 partíc. livre 1-D. (NR).

Extensão a 1 partícula num potencial externo $V(x)$

Se a partíc. se move num cpo. externo conservativo q deriva de 1 potencial $V(x)$, então há + invariância de translação, e podemos esperar q a (4.20) se modifique por

$$\boxed{H_{n,n} = a + V_n} \quad (4.32)$$ (V_n: real)

onde V_n depende do potencial no intervalo n. Por outro lado, a energia total da partíc. é agora

$$\boxed{E = \frac{p^2}{2m} + V(x)}, \quad (4.33)$$

($\frac{p^2}{2m}$: en. cinética; $V(x)$: energia pot.)

onde $p = p(x)$ (E se conserva).

Logo, podemos esperar q a (4.31) seja substituída por

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi} \quad (4.34)$$

q é a forma geral da eq. de Schröd. 1-D

Ao vetor linha $(\ldots C_{n-1}^* \; C_n^* \; C_{n+1}^* \ldots)$ estará assoc.

$$\boxed{\psi^*(x) = \lim_{\delta \to 0}\left(\frac{C_{n(\delta)}^*}{\sqrt{\delta}}\right)} \quad (4.35)$$

q é a função de onda hermit. (compl.) conj. (cf. (4.12)).

e satisfaz à eq. de Schröd. compl. conj.:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V(x)\,\psi^* \qquad (4.36)$$

4.3. Operadores e valores esperados

Podemos reescrever a (4.34) sob a forma (cf. (3.2))

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \qquad (4.37)$$

onde

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \qquad (4.38)$$

(operador diferencial; operador de multiplicação (= $\hat{1}$))

Indicaremos operadores c/ "chapéu" (circunflexo)

é 1 operador definido pela forma pela qual atua sobre funções de onda:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\,\psi \qquad (4.39)$$

(diferencial)

+ geralte, 1 operador (≡ oper. linear) $\hat{A}$, atuando sobre 1 função de onda $\psi(x,t)$, produz 1 função de onda $\varphi(x,t)$

$$\hat{A}\psi = \varphi \qquad (4.40)$$

e a linearidade significa que

$$\hat{A}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\hat{A}\psi_1 + \beta\hat{A}\psi_2 = \alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2 \qquad (4.41)$$

$\forall (\alpha, \beta \in \mathbb{C})$

As matrizes q discutimos antes são operadores, e veremos q operadores podem ser representados por matrizes. Na (4.38)

$$V(x) = V(x)\,\hat{1} \qquad (4.42)$$

($\hat{1}$ ↑ operador identidade)

e observáveis deverão ser representados por operadores

A generalização da idéia de valor esperado é imediata:

$$\langle X \rangle_u = u^+ X u = \text{prod. escalar de } u^{(+)} \text{ c/ } Xu$$

(hermiteano)

Analogia:

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle_\psi \equiv (\psi, \hat{A}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, \hat{A}\, \psi(x)\, dx} \quad (4.43)$$

(prod. escalar; cf. (4.43))

omitindo a dependência de t.

A: matriz hermiteana conjugada X^+ satisfaz a

$$\boxed{(w^+ X u)^* = u^+ X^+ w} \quad (4.44)$$

Analogia: o operador hermiteano conjugado A^+ é definido por

$$\boxed{(\varphi, \hat{A}\psi)^* = (\psi, \hat{A}^+ \varphi),} \quad (4.45)$$

($= (\hat{A}\psi, \varphi)$)

ou seja,

$$\boxed{\left[\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x)\, \hat{A}\, \psi(x)\, dx\right]^* = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, \hat{A}^+ \varphi(x)\, dx \quad \left(= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) [\hat{A}\psi(x)]^*\, dx\right)} \quad (4.46)$$

Em particular, p/ 1 observável $\hat{A}$, devemos ter

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle_\psi^* \equiv \langle \hat{A}^+ \rangle_\psi = \langle \hat{A} \rangle_\psi, \ \forall \psi} \quad (4.47)$$

ou seja,

$$\boxed{\hat{A} = \hat{A}^+} \quad (4.48)$$

Um observável é representado por um operador hermiteano

Se $\psi = \hat{B}\chi$ na (4.45)

$$(\varphi, \hat{A}\hat{B}\chi)^* = (\hat{B}\chi, \underbrace{\hat{A}^+\varphi}_{\xi}) = (\chi, \hat{B}^+\xi) = (\chi, \hat{B}^+\hat{A}^+\varphi)$$

o q dá

$$\boxed{(\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}} \quad (4.49)$$

Em partic., se $\hat{A}$ é hermiteano, o mmo. vale p/ $\hat{A}^2, \hat{A}^3, \ldots, \hat{A}^n$.

Em geral, como p/ 1 matriz,

$$\boxed{[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0} \quad (4.50) \qquad [\hat{A},\hat{B}]^{+} = [\hat{B}^{+},\hat{A}^{+}]$$

6ª aula - 27-08-91

Exemplo: Seja

$$\boxed{\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}} \quad (4.51)$$

(operador de diferenciação).

Temos

$$\boxed{(\varphi, \hat{A}\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^{*}(x)\, \frac{\partial \psi}{\partial x}\, dx} \quad (4.52)$$

$$(\varphi, \hat{A}\psi)^{*} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^{*}}{\partial x}\, \varphi(x)\, dx \equiv (\psi, A^{+}\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{*} A^{+} \varphi\, dx$$

P/ obter 1 expressão desta forma, basta integrar por partes:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^{*}}{\partial x}\, \varphi\, dx = \left[\psi^{*}\varphi\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{*}\, \frac{\partial \varphi}{\partial x}\, dx} \quad (4.53)$$

Como os vetores de estado são normalizáveis, ψ e φ devem ser quadrado-integráveis, e devemos esperar $\varphi \to 0$ no ∞:

$$\boxed{\varphi(\pm\infty) = \psi(\pm\infty) = 0} \quad (4.54)$$

Importância das condições de contorno p/ operadores diferenciais

de modo que obtemos

$$\boxed{(\varphi, \hat{A}\psi)^{*} = -\int_{-\infty}^{\infty} \psi^{*}\, \frac{\partial \varphi}{\partial x}\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{*}\, \hat{A}^{+}\varphi\, dx,} \quad (4.55)$$

ou seja,

$$\boxed{\hat{A}^{+} = -\frac{\partial}{\partial x}} \quad (4.56)$$

mostrando q o operador ∂ é anti-hermiteano. Note que

$\pm i\,\partial/\partial x$ é 1 operador hermiteano. → pois $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Como o quadrado de um operador hermiteano é hermiteano, concluímos que

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)^+ = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad (4.57)$$

Como $\hat{1}$ é obviamente hermiteano, resulta

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\hat{1} = \hat{H}^+ \qquad (4.58)$$

Veremos q representa o observável energia

ou seja, a Hamiltoniana é 1 operador hermiteano.

Daí resulta

Prob. 16 Demonstre que

$$\frac{\partial}{\partial t}\|\psi\|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\psi,\psi) = \left(\frac{\partial\psi}{\partial t},\psi\right) + \left(\psi, \underbrace{\frac{\partial\psi}{\partial t}}_{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi}\right)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}(\psi, \hat{H}\psi) + \text{c.c.}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[(\psi,\hat{H}\psi) - (\psi,\hat{H}^+\psi)\right] = \frac{1}{i\hbar}(\psi,(\hat{H}-\hat{H}^+)\psi) = 0$$

como antes (conservação da probabilidade)

7ª aula - 4-4

4.4. Operadores posição e momento

Como $|\psi(x,t)|^2 dx$ é a probab. de encontrar a partíc. entre x e $x+dx$, o valor esperado da posição da partícula é

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 x\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\,dx = \langle\hat{x}\rangle_\psi \qquad (4.59)$$

onde

$$\hat{x}\,\psi(x) = x\,\psi(x) \qquad (4.60)$$

é o operador posição da partícula (oper. de multiplic. por x).

Temos

$$\left.\begin{aligned} \hat{x}\,\hat{\frac{\partial}{\partial x}}\,\psi &= x\,\frac{\partial \psi}{\partial x} \\ \hat{\frac{\partial}{\partial x}}\,\hat{x}\,\psi &= \frac{\partial}{\partial x}\left[x\,\psi(x)\right] = x\,\frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \quad \hat{1}\psi \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\left[\hat{x}, \frac{\partial}{\partial x}\right] = -\hat{1}} \qquad (4.61)$$

P/ definir o observável velocidade $\hat{v}$ (ou momento $\hat{p} = m\hat{v}$), vamos usar o princípio de correspondência, pelo qual devemos ter

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle_\psi = \langle \hat{v} \rangle_\psi} \qquad (4.62)$$

onde a dependência temporal de $\langle \hat{x} \rangle_\psi$ vem de $\psi = \psi(x, t)$.

P/ $\forall$ observável $\hat{A}$, temos (cf. (3.33)), se $\hat{A}$ ñ depende explicitamente de t,

$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle_{\psi(t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\frac{d\psi^*}{dt}}_{-\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\psi)^*} \hat{A}\psi\, dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{A} \underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial t}}_{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi} dx$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\left[(\hat{H}\psi, \hat{A}\psi) - (\psi, \hat{A}\hat{H}\psi)\right]$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\left[(\psi, \hat{H}\hat{A}\psi) - (\psi, \hat{A}\hat{H}\psi)\right]$$

o q generaliza a (3.33):

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_\psi} \qquad (4.63)$$

No caso da (4.62), como $V(x) = V(x)\hat{1}$,

$$\boxed{[\hat{x}, V(x)] = 0} \qquad (4.64)$$

de modo que

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{H}] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\hat{x}, \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]} \qquad (4.65)$$

Temos

SEC/FENAME - Preço ver ...

$$\hat{x}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \hat{x}\,\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\hat{x}\right)\psi = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) = \frac{\partial}{\partial x}\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x}+\psi\right) = x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + 2\frac{\partial\psi}{\partial x} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\left[\hat{x}, \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] = -2\frac{\partial}{\partial x}} \quad (4.66)$$

Prob. 14. Mostre que

$$\boxed{[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]} \quad (4.67)$$

e use esta relação para deduzir a (4.66) a partir da (4.61).

Levando a (4.66) na (4.65), obtemos

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}} \quad (4.68)$$

$\therefore$

$$\boxed{\frac{1}{i\hbar}[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{\hbar}{im}\frac{\partial}{\partial x} = \hat{v}} \quad (4.69)$$

pelas (4.62) e (4.63). O operador momento é

$$\boxed{\hat{p} = m\hat{v} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}} \quad (4.70)$$

que é hermiteano, pelas (4.51) e (4.56).

3ª aula 11-11

Note que, usando a (4.61),

$$[\hat{x}, \hat{p}] = -i\hbar\underbrace{\left[\hat{x}, \frac{\partial}{\partial x}\right]}_{=-\hat{1}} \left\{ \boxed{[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar} \right. \quad (4.71)$$

que 1ª rela. de comutação de Heisenberg, de importância fundamental na MQ. Vemos q posição e momento (ou veloc.) da partícula são observáveis incompatíveis: não podem ser

determinados simultaneam^te. Voltaremos a discutir + tarde este pto. básico, em termos da rel. de incerteza.

Probl. 18: Mostre que

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{x^2+a^2}}$$

pode ser normalizado escolhendo convenientem^te a constante A, mas que $\langle x\rangle_\psi$ n~ ∃ p/ esta função de onda.

Probl. 19. Mostre que

$$\psi(x) = \frac{B}{(x^2+a^2)}\, e^{icx^4}$$

é normalizável, mas $\langle p\rangle_\psi$ n~ ∃ p/ este ψ. [Moral: Normalizabilidade n~ garante a ∃cia de valores esperados de observáveis importantes, como x e p].

4.5. O teorema de Ehrenfest

Do pto. de vista do princ. de correspondência, o q podemos esperar q + se aproxime das eqs. de mov^to clássicas são as eqs. de mov^to p/ valores esperados. Já vimos que

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle_\psi = \langle\hat{v}\rangle_\psi} \quad (4.72)$$

(usado p/ definir $\hat{v}$)

Vamos agora calcular

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle_\psi,$$

q deveria corresponder classicam^te à força (2ª lei de Newton). Pela (4.63),

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle_\psi$$

Note q temos ainda

$$\boxed{\hat{p}^2 = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}} \quad (4.73)$$

SIEC/FENAME

de modo que podemos escrever

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x) \qquad (4.74)$$

$\frac{\hat{p}^2}{2m}$ = Operador energia cinética

$\hat{V}(x) = V(x)\,\hat{1}$ = Operador energia potencial

de modo q $\hat{H}$ corresponde realt ao operador de energia total (Hamiltoniana clássica onde substituímos as grdezas clássicas por operadores):

$$H_{clássico} = \frac{p^2}{2m} + V(x) \longrightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x) \qquad (4.75)$$

Vamos calcular agora (cf. (4:63))

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle_\psi \qquad (4.76)$$

Obviamente,

$$[\hat{p}, \hat{p}^2] = 0 \qquad (4.77)$$

de modo que

$$[\hat{p}, \hat{H}] = [\hat{p}, \hat{V}(x)] \qquad (4.78)$$

Mas

$$[\hat{p}, \hat{V}(x)]\psi = -i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial x} V - V \frac{\partial}{\partial x} \right\} \psi$$

$$= -i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial x}(V\psi) - V \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \psi$$

de modo que

$$[\hat{p}, V(x)] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \qquad (4.79)$$

e a (4.76) dá então o teorema de Ehrenfest (1927)

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle_\psi = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle_\psi} \quad (4.80)$$

Classicam^{te}, a força F que atua sobre a partícula é dada por

$$\boxed{F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x}.} \quad (4.81)$$

Logo, os valores esperados obedecem à 2ª lei de Newton. Esta é 1 forma + satisfatória de justificar a eq. de Schrödinger p/ 1 partícula em 1-D.

4.6. Autovalores e autofunções da posição e momento

Os valores possíveis do ~~posição~~ observável $\hat{x}$ (posição da partíc.) são seus autovalores, que são todos os nºs reais x_0, c/ autofunções

$$\boxed{\hat{x}\,\psi_{x_0}(x) = x\,\psi_{x_0}(x) = x_0\,\psi_{x_0}(x)} \quad (4.82) \quad (x_0 \in \mathbb{R})$$

o q dá

$$\boxed{(x - x_0)\,\psi_{x_0}(x) = 0} \quad (4.83)$$

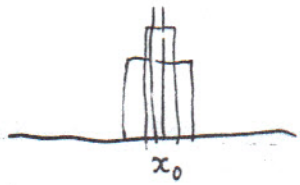
de modo q a autofunção correspondente, $\psi_{x_0}(x)$, deve ter a propriedade

$$\boxed{\psi_{x_0}(x) = 0\,, \quad \forall\, x \neq x_0} \quad (4.84)$$

Nenhuma função quadraticam^{te} $\int$vel de $\|\psi\|^2 = 1$ tem esta propr.; p/ 1 função, a (4.84) $\Rightarrow \|\psi_{x_0}\|^2 = 0$. Entretanto, a (4.83) é satisfeita por 1 "função imprópria" (distribuição), a "função" delta de Dirac

$$\boxed{\psi_{x_0}(x) = B\,\delta(x - x_0)} \quad (4.85)$$

onde B é 1 constante arbitrária. A (4.85) tb. ñ é "normalizável" (δ^2 ñ pode ser definido), mas podemos pensar em δ como limite de 1 sequência de funções cada vez + localizadas em x_0 c/ área constante (= 1):



A probab. de encontrar 1 partíc. num pto. é $=0$. É preciso passar à densidade de probab., ou à probab. num intervalo dx. Daí a ≠ça da normaliz. no espectro contínuo

. Localizar 1 partícula num pto. c/ precisão ∞ é fisicam.te impossível, mas podemos em princípio localizá-la c/ precisão arbitrariam.te gde, o q corresponde a δ como limite de 1 sequência.

~~Podemos tomar simplesm.te B = 1~~

Autofunções do momento

$$\boxed{\hat{p}\,\psi_p(x) = -i\hbar\frac{\partial\psi_p}{\partial x} = p\,\psi_p(x)} \quad (4.86)$$

$\therefore$

de Broglie

$$\boxed{\frac{\partial\psi_p}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar}\psi_p = ik\psi_p \quad \left(k = \frac{p}{\hbar}\right)} \quad (4.87)$$

A solução é

$$\boxed{\psi_p(x) = A\,e^{ipx/\hbar} = A\,e^{ikx}} \equiv \psi_k(x) \quad (4.86)$$

onde A é 1 const. (normaliz.) e $p \in \mathbb{R}\ \forall$: o momento pode tomar $\forall$ valor real (autovals. de 1 oper. hermiteano)

As autofunções do momento são ondas planas caminhantes c/ nº de onda $k = p/\hbar$; propagam-se p/ a direita se $p > 0$ e p/ a esquerda se $p < 0$.

A (4.86) dá

$$\boxed{|\psi_p(x)|^2 = A^2 = \text{const.}} \quad (4.87)$$

de modo que, como a (4.85), as autofunções do momento ñ podem ser normalizadas c/ norma finita: definir o momento c/ precisão ∞ é tão pouco físico como a posição, mas podemos ter precisão tão gde. qto. quisermos.

Pela interpret. probabilística, a (4.87) corresp. a 1 indeterminação completa da posição: 1 partíc. c/ momento bem definido pode ser encontrada em $\forall$ parte da reta c/ "= probab.". Este é 1 ex. da relação de incerteza, como veremos logo.

7ª aula: 16/9/92

Expansão em autofunções

normalização no espectro contínuo

Vimos no caso discreto q os autovetores $\{e_j\}$ normalizados de 1 matriz hermiteana formam 1 base: p/ ∀ vetor v,

$$v = \sum_j c_j e_j \,, \quad c_j = e_j^+ v \qquad (4.88)$$

O conj. dos autovalores dos operadores $\hat{x}$ e $\hat{p}$, q se chama o espectro desses operadores, é 1 conj. contínuo (espectro contínuo em lugar de espectro discreto), q corresp. a toda a reta $\mathbb{R}$. Entretanto, ainda vale o análogo da (4.88), ou seja, da expansão em autofunções, e isto permite normalizar as autofs. de $\hat{x}$ e $\hat{p}$ de forma q valha a eq. dos coefs. de exp., como vamos ver.

Em lugar de $\sum$ devemos de tomar $\int$ sobre todo o espectro. P/ a (4.85), devíamos, p/ ∀ $\varphi(x)$, a expansão

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(x_0)\, \psi_{x_0}(x)\, dx_0 = B \int_{\infty}^{\infty} c(x_0)\, \delta(x-x_0)\, dx_0$$

$$= B\, c(x) = B\left(\psi_{x_0}(x'),\, \varphi(x')\right) = B \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x'-x_0)\, \varphi(x')\, dx' \qquad (4.89)$$

ou seja, p/ q valha a (4.88), $\boxed{B = 1}$, e

$$\boxed{\varphi(x) = \int \varphi(x_0)\, \delta(x-x_0)\, dx_0} \quad , \quad \forall \varphi \qquad (4.90)$$

P/ as (4.86),

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, \psi_k(x)\, dk = A \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, e^{ikx}\, dk \qquad (4.91)$$

é 1 expansão em ∫ de Fourier, e sabemos q vale p/ funções de quadrado ∫vel, com

$$A\, c(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx}\, \varphi(x)\, dx = \frac{1}{2\pi A} \left(\psi_k, \varphi\right) \qquad (4.92)$$

P/ q se tenha a (4.88), deve ser $\frac{1}{2\pi A^2} = 1$, e basta tomar

Completeza (resol. da ident.)
$$\sum_j \hat{\Pi}_j = \sum_j e_j e_j^\dagger = 1$$

$$\boxed{A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}} \quad (4.93)$$

de modo q as autofunções de $\hat{p}$ <u>normalizadas no espectro contínuo</u> são

$$\boxed{\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad (k = p/\hbar)} \quad (4.94)$$

ou, se quisermos em p,

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp \quad \leftarrow p = \hbar k \qquad \Longrightarrow c(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \varphi(x)\, dx$$

$$\boxed{\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}} \quad (4.95)$$

No caso discreto, dínhamos a <u>rel. de ortonormalidade dos autovetores</u>

$$\boxed{e_j^\dagger e_k = \delta_{jk}} \quad (4.96)$$

$p \to x$ Completeza: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(x) \psi_p(x')\, dp = \delta(x - x')$

Neste caso, temos

$$\boxed{(\psi_{p'}, \psi_p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar}\, dx = \delta(p - p')} \quad (4.97)$$

onde a δ de Dirac é a generalização p/ o espectro contínuo da δ de Kronecker, ou seja, ainda temos ortogonalidade p/ autovalores $\neq$s, mas a "norma" p/ $p \to p'$ é ∞, de tal forma q se obtenha a δ de Dirac e permaneça válida a expansão em autofunções cl coefs. dados pelo produto escalar.

As autofunções de $\hat{x}$ têm 1 prop. análoga:

$$\boxed{(\psi_{x_0'}, \psi_{x_0}) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0')\, \delta(x - x_0)\, dx = \delta(x_0 - x_0')} \quad (4.98)$$

Completeza: $\int_{-\infty}^{\infty} dx_0\, \delta(x_0 - x)\, \delta(x' - x_0) = \delta(x - x')$

8ª aula - 6/4

4.7. Densidade de corrente de probabilidade

Além da conserv. global de probab. $\left(\frac{d}{dt}\|\psi\|^2 = 0\right)$, temos 1 conserv. local, como no caso da carga elétrica (eq. de continuidade).

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) &= \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi \\ \frac{\partial\psi}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi\right) \quad \ldots \\ \frac{\partial\psi^*}{\partial t} &= -\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + V(x)\psi^*\right) \quad \ldots \end{aligned}\right\}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right) = -\frac{\hbar}{2mi}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)} \quad (4.99)$$

o q podemos escrever

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0} \quad (4.100)$$

onde

Melhor usar a notação $\rho(x,t)$

$$\boxed{\rho(x,t) = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t)} \quad (4.101)$$

= dens. de probab. (análogo à dens de massa ou carga)

A (4.100) é a versão 1-D de

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} = 0} \quad (4.102)$$

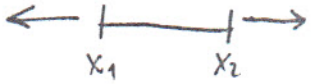
q é a eq. de continuidade (conserv. local). Logo, j é o análogo da dens. de corrente (de carga ou massa):

$$\boxed{j(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)} \quad (4.103)$$

representa a densidade de corrente de probabilidade: a probab se escoa como 1 fluido.

Se integrarmos os 2 mbros da (4.103)

sobre 1 segmento de x_1 a x_2, vem



$$\boxed{-\frac{\partial}{\partial t}\int_{x_1}^{x_2} \rho(x,t)\,dx = +\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial j}{\partial x}\,dx = j(x_2,t) - j(x_1,t)} \quad (4.104)$$

ou seja: taxa de decréscimo por un. de tpo. da probab. de encontrar a partíc. entre x_1 e x_2 = "fluxo" p/ fora da dens. corrente de probab. (= "fluxo" q sai por x_2 − "fluxo" q entra por x_1). Logo, j = fluxo de probab. por un. de tpo.

Em partíc., se formos sobre toda a reta ($x_1 \to -\infty$, $x_2 \to +\infty$), os fluxos no $\infty \to 0$ e recuperamos a lei de consev. global $\frac{d}{dt}\|\psi\|^2 = 0$.

Ex.:

$$\boxed{\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ipx/\hbar}} \quad (4.105)$$

$$\frac{\partial \psi_p}{\partial x} = i\frac{p}{\hbar}\psi_p \quad \left\{ \begin{array}{l} \psi_p^* \dfrac{\partial \psi_p}{\partial x} = i\dfrac{p}{\hbar}|\psi_p|^2 \\ \psi_p \dfrac{\partial \psi_p^*}{\partial x} = -i\dfrac{p}{\hbar}|\psi_p|^2 \end{array} \right\} \to$$

$$\Rightarrow \quad j(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left(2i\frac{p}{\hbar}\right)|\psi_p(x)|^2 \qquad \text{dens. de probab.}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{j(x) = \frac{p}{m}|\psi_p(x)|^2 = \rho(x)\,v} \quad \text{(veloc.)} \quad (4.106)$$

q é o análogo de $j = \rho v$ p/ 1 fluxo de partíc. de dens. ρ e veloc. v.

7ª aula - 29-08-91

4.8. Estados estacionários p/ 1 partíc. livre

P/ 1 estado estacionário,

$$\boxed{\psi_E(x,t) = \varphi_E(x)\, e^{-iEt/\hbar}} \quad (4.107)$$

c/

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial \psi_E}{\partial t} = E\psi_E = \hat{H}\psi_E} \quad (4.108)$$

o q dá

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_E}{dx^2} = E\varphi \qquad (4.109)$$

$k \to iK$

E tem de ser > 0; p/ $E<0$ as sols crescem exponenc^{te} p/ $|x|\to\infty$ ($x\to\infty$ ou $x\to-\infty$)

ou seja,

$$\frac{d^2\varphi_E}{dx^2} + k^2\varphi = 0\,, \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \qquad (4.110)$$

q é a eq do oscil. harmônico, cl a sol. geral

$$\varphi_E(x) = A_+ e^{ikx} + A_- e^{-ikx}\,, \qquad k = +\sqrt{k^2} \qquad (4.111)$$

Levando na (4.107), vemos q o estado estacionário geral de 1 partíc. livre cl autovalor E é

$$\psi_E(x,t) = \left(A_+ e^{ipx/\hbar} + A_- e^{-ipx/\hbar}\right) e^{-iEt/\hbar} \qquad (4.112)$$

onde, pela (4.110)

$$p = \sqrt{2mE} \quad \left\{ \quad E = \frac{p^2}{2m} \right. \qquad (4.113)$$

$\to E \geq 0$ → Espectro = semireta real ≥ 0

q é a rel. entre energia e momento de 1 partíc. livre.

A (4.112) é 1 superposição de 2 autoestados do momento: $+p$ e $-p$, ambos cl a mma energia E, o q fornece o 1º exemplo de degenerescência: cada autovalor E é duplamente degenerado, correspondendo à possibil. da partícula se mover p/ a direita ou p/ a esquerda cl a mma energia E.

Como sabemos, a (4.112) n é normalizável. Uma interpretação possível, q é bastante usada, é interpretar 1 estado como

$$\psi_E^+(x,t) = A_0\, e^{ipx/\hbar - iEt/\hbar} \qquad (4.114)$$

como representando n 1 partícula única, mas 1 feixe estacionário de partículas de momento $+p$ e energia E (feixe monoenergético). A densidade do feixe (nº de partíc./un de volume) é dada por

$$\rho = |\psi|^2 = |A|^2 \qquad (4.115)$$

e a densidade de corrente de partícs (nº/un. de área e tempo) fluxo/un tpo., pela (4.106), é ρv, onde $v = p/m = \hbar k/m$.
A idéia é q o feixe (desprezando ∀ interações entre suas partícs.) pode ser pensado como 1 gde. nº de repetições independentes (e simultâneas) da experiência c/ 1 só partícula.

Analogamte, a (4.112) representaria a superposição de 2 feixes indep. de partícs. 1 viajando p/ a direita e outro p/ a esquerda.

Probl. 20. Mostre que, neste caso,

$$\boxed{j = v(|A_+|^2 - |A_-|^2)} \quad (4.116)$$

e interprete os 2 termos, e que

$$\boxed{\rho = |\psi|^2 = |A_+|^2 + |A_-|^2 + A_+ A_-^* e^{2ipx/\hbar} + A_- A_+^* e^{-2ipx/\hbar}}, \quad (4.117)$$

(q contém termos oscilatórios de interferência, demonstrando propr. ondulatórias).

9ª aula (16-04)

4.8. Relação de incerteza e pacotes de onda

Basta subst. o prod. escalar de matrizes pelo de operadores

A dem. da rel. de incerteza (2.80) permanece válida p/ 2 observáveis ∀ $\hat{X}$ e $\hat{Y}$:

$$\boxed{(\Delta X)_\psi (\Delta Y)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{X}, \hat{Y}] \rangle_\psi|} \quad (4.118)$$

onde

$$\boxed{(\Delta X)_\psi \equiv \sqrt{\langle \hat{X}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{X} \rangle_\psi^2}} \quad (4.119)$$

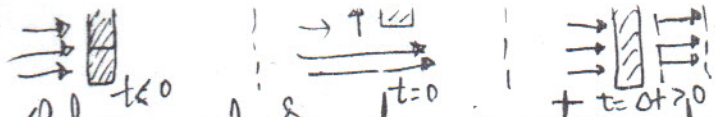
$\langle \|X\|^2 \rangle_\psi \equiv \langle X^+ X \rangle_\psi = \int \underbrace{(\psi^* \hat{X}^+)}_{(\hat{X}\psi)^*} \hat{X} \psi \, dx \geq 0 \quad \forall \hat{X}$

$\therefore \langle \|\hat{X} + i\lambda \hat{Y}\|^2 \rangle_\psi \geq 0$

$$\left.\begin{array}{l} \hat{X} = \hat{x} \\ \hat{Y} = \hat{p} \end{array}\right\} \quad [\hat{X}, \hat{Y}] = [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (\text{cf. } (4.71))$$

$\therefore$

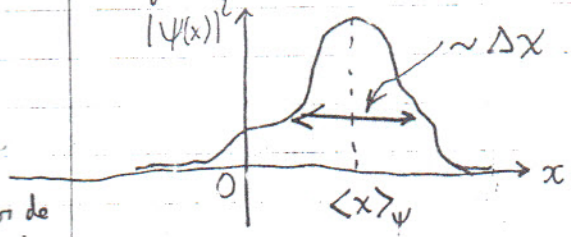
$$\boxed{\Delta x \, \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar} \quad (4.120)$$



q é a célebre relação de incerteza de Heisenberg p/ posição e momento de 1 partíc. no caso 1-D

Já vimos 1 ilustração p/ os autoestados do momento: $\Delta p = 0 \Rightarrow \Delta x \to \infty$. Vamos ver agora como interpretar a (4.120) vendo o q acontece qdo. se procura localizar 1 partíc. c/ incerteza Δx.

A distrib. de probab. em posição é dada por $|\psi(x)|^2$, de modo q a incerteza Δx corresponde ≈te à "largura" Δx dessa distrib. (definição ≠ da anterior)



Podemos pensar em produzir 1 sit. deste tipo colocando 1 obturador no caminho de 1 feixe de partícs. e abrindo-o só durante 1 intervalo Δt mto. pequeno, de modo a deixar passar só 1 partíc., cuja posição terá 1 incerteza $\Delta x \sim v\Delta t$ (v = veloc. do feixe).

Valores de 10^{-15} segundos p/ luz de laser

P/ obter Δp, precisamos da distrib. de probab. em momento; Δp será a largura desta distrib.. P/ obtê-la, basta expandir $\psi(x)$ em autofunções do momento:

$$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp} \qquad (4.121)$$

$$\psi_p(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

onde usamos a normaliz. do contínuo.

A (4.121) é 1 $\int$ de Fourier: c/ $p = \hbar k$, podemos escrevê-la:

$$\boxed{\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, e^{ikx}\, dk, \qquad \underbrace{c(k)}_{\tilde{\psi}(k)} = \sqrt{\hbar}\, \tilde{\psi}(p)} \qquad (4.122)$$

Logo,

$$\boxed{c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{-ikx}\, dx} \qquad (4.123)$$

o q equivale a

$$\boxed{\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{-ipx/\hbar}\, dx = (\psi_p, \psi)} \qquad (4.124)$$

(cf. (4.95)).

Temos:

$$\|\psi(x)\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)\,dx$$

$$\psi^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c^*(k)\, e^{-ikx}\,dk$$

Admitindo q se pode inverter a ordem das $\int$s

$$\Rightarrow \|\psi(x)\|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi(x) \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-ikx} c^*(k) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk\, c^*(k) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} \psi(x)}_{c(k)}$$

ou seja,

$$\|\psi(x)\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\psi^*(x)\psi(x)}_{|\psi(x)|^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} |c(k)|^2\,dk \qquad (4.126)$$

q é a relação de Parseval (Bessel-). Logo, c/ $c(k) = \sqrt{\hbar}\,\tilde{\psi}(p)$

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p)\,\tilde{\psi}(p)\,dp \qquad (4.127)$$

onde pela (4.124):

$$|\tilde{\psi}(p)|^2_{dp} = |(\psi_p, \psi)|^2_{dp} \qquad (4.128)$$

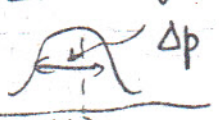
Pela Regra II, podemos dizer que a (4.128) representa a densidade de probabilidade no "espaço dos momentos", ou seja,

$$|\tilde{\psi}(p)|^2 dp = \text{probab. de encontrar a partíc. c/ momento entre } p \text{ e } p+dp \qquad (4.129)$$

$\tilde{\psi}(p)$ é a "função de onda no espaço dos momentos"

$\psi(x)$ = " " " " das configurações.

Logo, Δp é a "largura" da curva $|\tilde{\psi}(p)|^2$.



8ª aula 21/9/92

$\psi(x,0) = \frac{1}{(\pi a)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2a}}$

Estas defs. são + gerais do q as pelo desvio quadrático médio, e permitem definir incertezas em casos em que $(\Delta X)_\psi$ como definido anteriorm^te diverge.

Probl. 21. Seja

$$\psi(x) = \begin{cases} C \text{ (constante) p/ } x_0 - \frac{\Delta x}{2} < x < x_0 + \frac{\Delta x}{2} \\ 0 \quad \text{fora} \end{cases} \qquad (4.130)$$

≈ "pacote" cortado por 1 obturador aberto durante $\Delta t = \frac{\Delta x}{v}$

(a.) Normalize ψ
(b) Calcule $\tilde{\psi}(p)$
(c) Faça um gráfico de $|\tilde{\psi}(p)|^2$
(d) Estime Δp e comente o resultado.

PACOTES DE ONDA 1-D

A partir da (4.121) podemos representar o estado + geral possível de 1 partícula livre 1-D como expansão em estados estacionários:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\, e^{ipx/\hbar}\, e^{-iEt/\hbar}\, dp \qquad (4.131)$$

note que é 1 superpos. de estados estacs. da forma (4.112) (Escrevendo $\int_{-\infty}^{\infty} = \int_{-\infty}^{0} + \int_{0}^{\infty}$)

onde

$$E = p^2/m \qquad (4.132)$$

e, pela (4.127),

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = 1 \qquad (4.133)$$

Vetor de estado normalizado (ao contrário de $\psi_p(x)$, q n é normalizável)

p/ $t = 0$, (4.134)

$$\psi(x,0) = \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp$$

$$\therefore \tilde{\psi}(p) = (\psi_p(x), \psi_0(x)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x)\, e^{-ipx/\hbar}\, dx$$

A (4.131) é a SOL. GERAL DA EQ. de Schröd. 1-D p/ 1 partícula livre, q satisfaz à cond. inicial (4.134).

MEC/FENAME - PROF. [illegible]

Análogo da sol. $x = x_0 + vt$ em 1-D (MRU) na Mec. Clássica
c/ $x_0 \approx \langle \hat{x} \rangle_{\psi_0}$, $v = \frac{1}{m}\langle \hat{p} \rangle_{\psi_0}$

Ela representa 1 pacote de ondas 1-D (superposição de ondas planas) (A (4.130) é 1 caso particular)

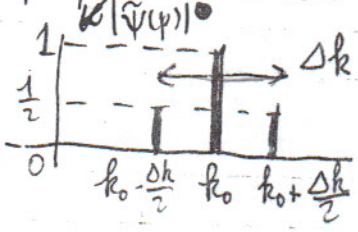
Vamos estudar 1º a forma do pacote p/ t fixo (e depois a evol. temporal), q pode ser escrita como

$$\boxed{\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, e^{ikx}\, dk} \quad (4.135)$$

onde

$$\boxed{|c(k)|^2 = \frac{\hbar}{2\pi}|\tilde{\psi}(p)|^2, \quad p = \hbar k} \quad (4.136)$$

P/ entender o q acontece, consideremos 1º um caso partic. mto. especial, q ñ é propriam.te 1 pacote: 1 superpos. de 3 autoestados de momento, c/ nº de onda k_0 (ampl. 1) e $k_0 \pm \frac{\Delta k}{2}$ (ampl. $\frac{1}{2}$):



$$\boxed{\psi(x) = \underset{\text{const.}}{C}\left(\frac{1}{2}e^{i(k_0 - \frac{\Delta k}{2})x} + e^{ik_0 x} + \frac{1}{2}e^{i(k_0 + \frac{\Delta k}{2})x}\right)} \quad (4.137)$$

(ñ - normalizável)

Temos

$$\boxed{\begin{aligned}\psi(x) &= C e^{ik_0 x}\left[1 + \frac{1}{2}\left(e^{-i\frac{\Delta k}{2}x} + e^{i\frac{\Delta k}{2}x}\right)\right] \\ &= C e^{ik_0 x}\left[1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right)\right] = 2C e^{ik_0 x}\cos^2\left(\frac{\Delta k}{4}x\right)\end{aligned}} \quad (4.138)$$

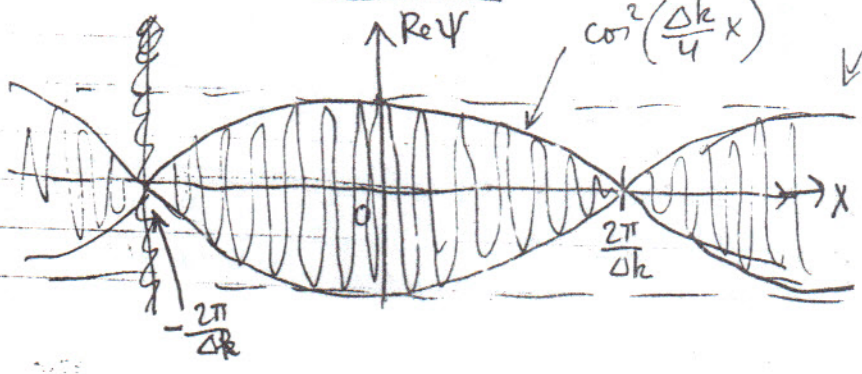
onde supomos $\boxed{\Delta k \ll k_0}$ (4.139)

$\mathrm{Re}\,\psi \propto \cos(k_0 x)\cos^2\left(\frac{\Delta k}{4}x\right)$

envoltória

Incerteza em momento:

$$\boxed{\Delta p \sim \hbar \Delta k} \quad (4.139)$$

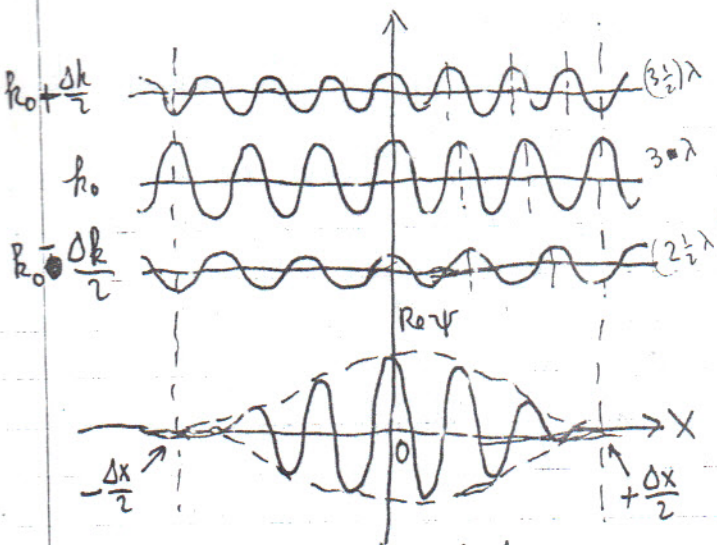


Batimentos

"Largura em x" — imprópria (na verdade ∞)

$$\boxed{\Delta x \gtrsim \frac{4\pi}{\Delta k}} \quad (4.140)$$

$$\therefore \boxed{\Delta x \Delta p \gtrsim 4\pi\hbar} \quad (4.141)$$



De onde vem Δx?
P/ $x = 0$, as 3 ondas interferem construtivamente (máx.). P/ q as 2 laterais interfiram destrutivamente c/ a central, é preciso ir a distâncias $\pm \frac{\Delta x}{2}$ do máximo. Daí que caiba + $\frac{1}{2}$ comp. de onda

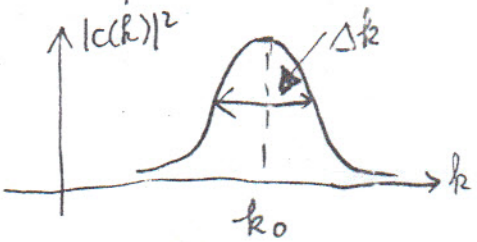
$$\frac{\Delta k}{2}\cdot\frac{\Delta x}{2} = \pm\pi$$

o q dá

$$\Delta k\,\Delta x = 4\pi$$

Este é 1 exemplo geral p/ Trs de Fourier: a largura Δk da transformada é $\gtrsim 1/\Delta x$, onde Δx é a " da função q se transforma. Ex.: Prob. 21.

P/ ver isto de 1 maneira geral, consideremos o pacote (4.135) e suponhamos q $|c(k)|^2$ tem 1 pico c/ centro k_0 e largura Δk, de modo q só contribui apreciavelmente à Σ o intervalo $[k_0 - \frac{\Delta k}{2},\ k_0 + \frac{\Delta k}{2}]$.



Podemos então escrever

$$c(k) = |c(k)|\, e^{i\delta(k)} \qquad (4.142)$$

Superpos. de ondas (interferência)

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} |c(k)|\, e^{i[kx + \delta(k)]}\, dk \qquad (4.143)$$

P/ ≠s valores de x, resultados ≠s por interferência

onde só contribui apreciavelmente o intervalo acima.

P/ q valor de x ocorrerá 1 máx. de $|\psi(x)|^2$? Onde a interferência seja "o + construtiva possível", ou seja, qdo a fase é estacionária no pto. x_0 onde $|c(k)|$ é máximo ($k = k_0$)

$$\left.\frac{d}{dk}[kx + \delta(k)]\right|_{k=k_0} = 0 \qquad (4.144)$$

q é o <u>princípio da fase estacionária</u>:

$$x_0 + \delta'(k_0) = 0 \quad \left\{ \quad x_0 = -\delta'(k_0) \right. \qquad (4.146)$$

(no ex. acima, (4.138), $\delta(k) = 0$ e achamos 1 máx. em $x = 0$)

P/ achar a forma do pacote, podemos expandir $\delta(k)$ em torno deste pto.: p/ Δk suf^te pequeno, basta tomar

$$\delta(k) \approx \delta(k_0) + (k - k_0)\delta'(k_0) \qquad (4.147)$$

($-x_0$)

ou seja, supondo q as correções são desprezíveis

$$\psi(x) \approx e^{i[k_0 x + \delta(k_0)]} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} |c(k)|\, e^{+i(k-k_0)x} \cdot e^{\overbrace{i(k-k_0)\delta'(k_0)}^{-x_0}}\, dk$$

$$\approx e^{i[k_0 x + \delta(k_0)]} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} |c(k)|\, e^{i(k-k_0)(x-x_0)}\, dk \qquad (4.148)$$

P/ $x = x_0$, o fator de fase é = 1. P/ achar a largura do pacote: $|\psi(x)|$ começará a cair apreciavelmente qdo. o fator de fase causar interferência destrutiva, nos extremos do intervalo

$$(k \pm k_0)(x \pm x_0) = \pm \left(\frac{\Delta k}{2}\right)\left(\frac{\Delta x}{2}\right) = \pm \pi$$

$$\Longrightarrow \boxed{\Delta x \, \Delta k \sim 4\pi} \qquad (4.149)$$ como antes.

Logo, é 1 propr. geral da ∫ de Fourier que

$$\boxed{\Delta x \, \Delta k \gtrsim 1} \qquad (4.150)$$

(1, 2π, 4π são equivs. p/ a rel. de incerteza)

Isto vale p/ <u>ondas clássicas</u>: p/ transmitir sinais de duração temporal Δt c/ ondas (de rádio, p/ ex.), é preciso ter 1 <u>largura de faixa de frequ.</u> $\Delta\omega$ tal que

$$\boxed{\Delta\omega \, \Delta t \gtrsim 1} \qquad (4.151)$$

1 "canal" de rádio perfeito deveria ter ~ 40 kHz de larg. em AM mas as estações comerciais (AM ~ 1.000 kHz) têm $\Delta\nu \sim 10$ kHz

Assim, p/ transmitir sinais de áudio (som) c/ ondas de rádio, é preciso q as ondas de rádio tenham 1 largura de faixa

$$\boxed{(\Delta\omega)_{\text{rádio}} \sim \left(\frac{1}{\Delta t}\right)_{\text{áudio}} \sim (\Delta\omega)_{\text{áudio}}} \quad \left(\ll (\omega_0)_{\text{rádio}}\right). \qquad (4.152)$$

(modulação de ampl. ou de frequ.) AM, FM

$(\Delta\omega)_{\text{áudio}} \sim 20$ kHz

$\omega_{\text{rádio}} \sim 10^5$ Hz

Explic. de pq. ∃ "canais" de rádio (ou TV)

Quantica^{te}, pela rel. de de Broglie,

$$\boxed{\Delta p = \hbar \Delta k} \qquad (4.153)$$

o q leva à rel. de incerteza p/ 1 pacote de ondas livre (sol. geral da eq. de Schröd. livre)

$$\boxed{\Delta x \, \Delta p \gtrsim \hbar} \qquad (4.154).$$

Mas agora c/ defs. ≠s de Δx e Δp!

$\boxed{9^{\text{a}} \text{ aula} - 9/4}$

4.9. Evolução temporal de 1 pacote de ondas livre

Obtivemos 1 "instantâneo" do pacote de ondas livre num dado instante t_0. Como evolui o pacote no tempo?

Fator de propag. p/ ondas monocroms.:

$$\boxed{e^{i(kx - \omega t)}} \qquad (4.155)$$

Se tivéssemos

$$\boxed{\omega = k v} \quad (\text{c/ } v = \text{constante}) \qquad (4.156)$$

Como p/ ondas EM no vácuo ($v = c$) ou ondas de som no ar

teríamos p/ o fator de propag.

$$\boxed{e^{ik(x - vt)}} \qquad (4.157)$$

q seria função só de $x - vt$, de modo q o pacote se deslocaria como 1 todo, c/ veloc. v (sem deformação).

Mas temos

$$\boxed{\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{1}{\hbar}\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{\hbar}\frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{\hbar k^2}{2m}} \qquad (4.158)$$

q é quadrático em k. Logo,

$$\boxed{V_\phi = \frac{\omega}{k} = \text{veloc. de fase} = \frac{\hbar k}{2m}} = V_\phi(k) \qquad (4.159)$$

78)

de modo q temos o análogo da propag. de ondas num meio dispersivo

$$\text{Plasma: } v_\phi = \frac{c}{n}, \quad n = n(\omega)\ (n(k)) \quad \text{("índice de refr.")} \qquad (4.160)$$

em geral

o q leva a 2 efeitos: (a) Veloc. de propag. do pacote (pico) = veloc. de grupo $v_g \neq v_\phi$; (b) Distorção da forma do pacote c/ o tempo.

P/ ver o 1º efeito, consideremos novamente o caso de 3 ondas, mas agora c/ a depend. temporal:

$$\psi(x,t) = C\left[\frac{1}{2}e^{i(k_0-\frac{\Delta k}{2})x - i(\omega_0-\frac{\Delta\omega}{2})t} + e^{i(k_0x-\omega_0t)} + \frac{1}{2}e^{i(k_0+\frac{\Delta k}{2})x - i(\omega_0+\frac{\Delta\omega}{2})t}\right] \qquad (4.161)$$

onde $\omega(k)$ é dado pela (4.158).

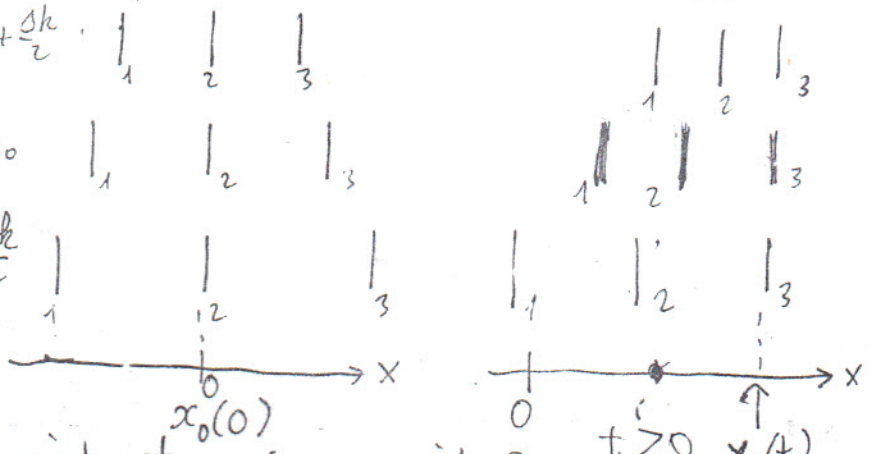
$$\psi(x,t) = Ce^{i(k_0x-\omega_0t)}\left\{1 + \frac{1}{2}e^{-i(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t)} + \frac{1}{2}e^{i(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t)}\right\}$$

$$\psi(x,t) = Ce^{i(k_0x-\omega_0t)}\left\{1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x - \frac{\Delta\omega}{2}t\right)\right\}$$

$$= Ce^{i(k_0x-\omega_0t)} \cdot 2\cos^2\left(\frac{\Delta k}{4}x - \frac{\Delta\omega}{4}t\right) \qquad (4.162)$$

No instante t, o "centro" $x_0 = 0$ da envoltória se desloca com

$$x_0 = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}t = v_g t \qquad (\neq \frac{\omega}{k}t \text{ pq } \omega \text{ não é linear em } k). \qquad (4.163)$$



↙ Posições de 3 cristas de onda consecutivas p/ cada 1 das 3 ondas q interferem p/ $x=0$ e $x=t$.

$t=0$: cristas 2 interferem construt.

No inst. t, são as cristas 3 q interferem construt., pq a veloc. de fase v_ϕ p/ $k_0+\frac{\Delta k}{2}$ é > q p/ k_0 e esta é > q p/ $k_0-\frac{\Delta k}{2}$.

P/ o caso geral, achamos a posição do "centro" do pacote pelo princípio da fase estacionária

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, e^{i(kx-\omega t)}\, dk = \int_{-\infty}^{\infty} |c(k)|\, e^{i[kx-\omega t+\delta(k)]}\, dk \qquad (4.164)$$

onde

$$k = \frac{p}{\hbar}\,, \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \qquad (4.165)$$

$$0 = \frac{d}{dk}\left[kx - \omega(k)t + \delta(k)\right]\Big|_{k_0} = x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} t + \underbrace{\delta'(k_0)}_{-x_0} \qquad (4.166)$$

o q dá

$$x_{max} = x_0 + v_g t \qquad (4.167)$$

onde

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} = \text{veloc. de grupo} \qquad (4.168)$$

generaliza a (4.163).

Se $\omega = v_\phi k \Longleftrightarrow v_g = v_\phi$ (meio não dispersivo) (4.169)

No caso atual,

$$v_g = \frac{d}{dk}\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)_{k_0} = \left(\frac{\hbar k_0}{m}\right) = \frac{p_0}{m} \qquad (4.170)$$

q é a veloc. da partícula clássica de momento p_0.

P/ Δk suf^te pequeno,

$$p_0 = \langle p \rangle_\psi \qquad (4.171)$$

de modo que

$$x_{max} = x_0 + \frac{p_0}{m} t \qquad (4.172)$$

é o Movto retilíneo e uniforme da partíc. clássica esperado pelo Teorema de Ehrenfest. Entretanto, ainda é preciso, em geral, estudar a deformação do pacote c/ o tpo.

MEC/FENAME - Proj...

Pacote gaussiano

Probl. 22. Mostre que o estado — Pacote gaussiano

$$\psi_a(x) = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \quad (4.173)$$

é normalizado, e calcule $\langle x \rangle_{\psi_a}$ e $(\Delta x)_{\psi_a}$ para este estado. Mostre que

$$\langle \hat{H}_0 \rangle_{\psi_a} = \frac{\hbar^2}{4a^2 m}, \quad \text{onde } \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Probl. 23. Mostre que, para o ~~estado~~ pacote gaussiano,

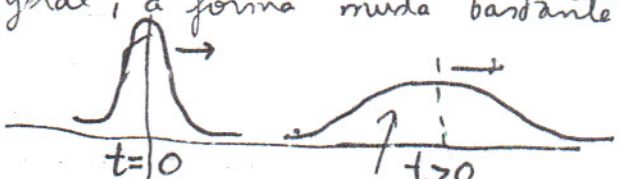
$$(\Delta x)_{\psi_a} (\Delta p)_{\psi_a} = \frac{1}{2}\hbar$$

de modo que é 1 estado de incerteza mínima. Interprete o resultado obtido para $\langle \hat{H}_0 \rangle_{\psi_a}$ em termos de $(\Delta p)_{\psi_a}$.

O pacote inicial gaussiano ($\psi(x,t) = \psi_a$ p/ $t=0$) tem outras propriedades notáveis. Pode-se mostrar que a transf. de Fourier de 1 função gaussiana é tb. 1 gaussiana, c/ as larguras relacionadas por $\Delta x\, \Delta k \sim 1$. Se tomarmos 1 gaussiana no espaço dos momentos como pacote inicial, c/ centro em $k_0 = p_0/\hbar$,

$$C(k) = A\, e^{-\frac{b}{2}(k-k_0)^2}, \quad (4.174)$$

$\psi(x,t)$ dado pela (4.164) pode ser calculado explicitamente (cf. Schiff, Cohen-Tannoudji) e acha-se q ~~a forma do~~ o centro do pacote se move c/ veloc. $\hbar k_0/m = v_g$, como tinha de ser. Mas tb. se pode obter a forma: verifica-se q o pacote permanece gaussiano (o q é excepcional: em geral, a forma muda bastante), mas se alastra: A largura $\Delta x(t)$, p/ $t \to \infty$, tb. $\to \infty$ com



(A área permanece = 1)

$$\Delta x \approx \frac{(\Delta p)}{m} t \quad \text{p/ } t \to \infty \quad (4.175)$$

(∴ $\Delta x\, \Delta p$ torna-se $\gg \frac{1}{2}\hbar$ e $\to \infty$ c/ t), como se tivéssemos 1 grupo de partíc. clássicas concentradas perto de $x=0$ p/ $t=0$ c/ dispersão de veloc. $\Delta v = \Delta p/m$. O alastramento de 1 pacote livre é 1 fenômeno geral, ~~e~~ e a estimativa (4.175) tb. é geral.

Analogia c/ enxame de abelhas

Energia de localização: $\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x} \Rightarrow \Delta E \sim \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}$

Evolução temporal de um pacote gaussiano

Se fizermos, na sol. geral (4.131), (4.134), $p = \hbar k$, vem

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k)\, e^{ikx - iEt/\hbar}\, dk \quad ; \quad E = \frac{(\hbar k)^2}{2m} \qquad (1)$$

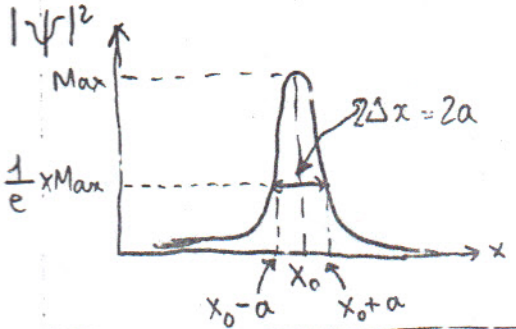
$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0)\, e^{-ikx}\, dx$$

($p/t = 0$, teor. da $\int$ de Fourier). Conds. iniciais: (δx = larg. do pico)

Pacote inicial cl centro em $x = x_0$ e largura $\delta x = a$
Veloc. " $v_0 = \hbar k_0 / m$ (2)

P/ 1 pacote gaussiano, isto $\equiv a$

$$\psi(x,0) = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right] e^{ik_0 x} \qquad (3) \rightarrow |\psi(x,0)|^2 = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}}$$



Normalização: $\xi = \frac{x - x_0}{a}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,0)|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}\, a} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{x-x_0}{a}\right)^2} \underbrace{\frac{dx}{a}}_{d\xi}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = 1 \quad (\text{OK}).$$

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\underbrace{(k-k_0)}_{\equiv K} x}\, e^{-\frac{\overbrace{(x-x_0)^2}^{\equiv \xi}}{2a^2}} \underbrace{dx}_{d\xi} \qquad (4)$$

Exponente: $\frac{\xi^2}{2a^2} + iKx = iKx_0 + \left(\frac{\xi}{\sqrt{2}a}\right)^2 + iK\xi$

$$= iKx_0 + \left(\frac{\xi}{\sqrt{2}a}\right)^2 + 2 \cdot \frac{\xi}{\sqrt{2}a} \cdot i\frac{a}{\sqrt{2}} \cdot K + \left(\frac{ia}{\sqrt{2}}K\right)^2 - \left(\frac{ia}{\sqrt{2}}K\right)^2$$

$$= iKx_0 + \frac{1}{2}a^2K^2 + \left(\frac{\xi}{\sqrt{2}a} + \frac{ia}{\sqrt{2}}K\right)^2 \qquad (5)$$

i.e., ↓ Exercício

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a^2}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[i\left(k_0 x - \frac{\hbar k_0^2}{2m}t\right)\right] \cdot \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\left[\left(\frac{a^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}\right)K^2 - iK\eta\right]\right\} dK \quad (10)$$

onde $\eta = x - x_0 - \frac{\hbar k_0}{m}t$ (11)

Usando de novo a propriedade da transformada de Fourier da gaussiana,

$$\psi(x,t) = \left(\frac{a^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{i\left(k_0 x - \frac{\hbar k_0^2}{2m}t\right)} \cdot \times \frac{1}{\sqrt{a^2 + \frac{i\hbar t}{m}}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\frac{\overbrace{\left(x - x_0 - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}^{\eta^2}}{\left(a^2 + \frac{i\hbar t}{m}\right)}\right\} \quad (11)$$

que, para $t = 0$, se reduz à (3). A (11) é um pacote gaussiano centrado em $= v_g$ (velocidade de grupo)

$$x = x_0 + \frac{\hbar k_0}{m}t = x_0 + v_0 t \quad (12)$$

(Movto retilíneo e uniforme: teor. de Ehrenfest)

Quanto à largura, ← Contribui p/ a fase (no expoente)

$$\frac{1}{a^2 + \frac{i\hbar t}{m}} = \frac{a^2 - \frac{i\hbar t}{m}}{(a^2)^2 + \left(\frac{\hbar t}{m}\right)^2} \quad (13)$$

$$\frac{\hbar}{ma} = \frac{\delta p(0)}{m} = \frac{\delta v}{m}$$

o que dá

$$[\delta x(t)]^2 = a^2 + \left(\frac{\hbar t}{ma}\right)^2 = [\delta x(0)]^2 + \underbrace{[\delta v(0)]^2 t^2}_{=\delta v(t)} \quad (14)$$

correspondendo ao alastramento com $(\delta v)t$. | Note que $\delta x(t)\,\underbrace{\delta p(t)}_{=\delta p(0)} \to \infty$ com t

Isto significa q a incerteza na posição da partíc. torna-se cada vez > (embora numa dada observação ela apareça localizada num pto.: é a distrib. de probab. q se alastra).

Se tivermos $\psi(x,t=0) = 0$ fora de 1 intervalo (como no probl. 21), será $\psi(x,t>0) \neq 0$ p/ $\forall x$, ou seja, há probab. $\neq 0$ de encontrar a partíc. a $\forall$ distância p/ $t = \varepsilon > 0$ arbitrariam.te pequeno (embora a probab. seja mto. pequena). Isto resulta do caráter NR da eq. de Schröd.: o pacote inicial, no espaço dos momentos, contém momentos arbitrariam.te gdes.: ñ há limite superior p/ a veloc. das partículas (relativísticam.te, c é a veloc. limite).

5. MOVIMENTO 1-D NUM POTENCIAL

5.1. Estados estacionários num pot. $V(x)$

1 estado estac. de energia E é descrito por 1 autofunção de onda da forma

$$\boxed{\psi(x,t) = \varphi_E(x)\, e^{-iEt/\hbar}} \qquad (5.1)$$

$$\therefore \quad \boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi}$$

onde φ_E é 1 autofunção de E:

$$\boxed{\hat{H}\varphi_E(x) = E\varphi_E(x)} \qquad (5.2)$$

O conj. dos autovalores E correspond. define o espectro de energia do sistema.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

$\therefore$ a (5.2) fica (omitindo o índice E)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

ou

$$\boxed{\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\varphi(x) = 0} \qquad (5.3)$$

em 3D → em 1-D

A propag. de ondas num meio de índice de refr. n é descrita pela eq. de ondas

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0 \quad , \quad v = \frac{c}{n} \qquad (5.4)$$

$$\psi(x,t) = \varphi(x)\, e^{-i\omega t} \left\{ \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\omega^2\psi \right. \qquad (5.5)$$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + n^2\frac{\omega^2}{c^2}\varphi = 0 \left\{ \frac{d^2\varphi}{dx^2} + n^2 k_0^2 \varphi(x) = 0 \right. \qquad (5.6)$$

$k_0 = \omega/c$

Comparando (5.6) a (5.3), obtemos 1 <u>analogia ótico-mecânica</u>: a eq. de Schröd. estacionária (5.3) é análoga à eq. de ondas num meio de índice de refração variável c/ x (meio inhomogêneo), cf

$$n^2(x)\, k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)] = k_0^2\left[1 - \frac{V(x)}{E}\right] \qquad (5.7)$$

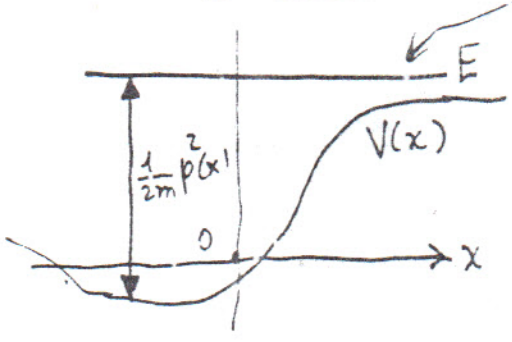
(partículas de energia E)

(k_0 corresp a $V=0$)

P/ n = constante, o fator de propagação de 1 onda em x é

$$e^{\pm i n k_0 x} \qquad (5.8)$$

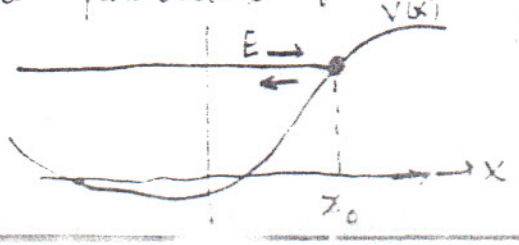
Energia ilimitada



Na Mec. Clássica, 1 partícula de energia total E movendo-se num cpo. de forças de en. pot. $V(x)$, temos (fig.)

$$E - V(x) = \frac{1}{2m}p^2(x) = \text{Energia cinética na posição } x$$

$\Rightarrow$ tem de ser ≥ 0 p/ q a posição x seja acessível a partícula (região chamada <u>permitida</u>)

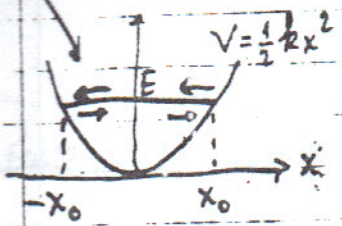


Em pot. x_0 p/ o qual

$$E = V(x_0) \qquad (5.10)$$

Trajetória clássica confinada entre os pts. de retorno $-x_0$ e $+x_0$

é 1 pto. p/ o qual $p(x_0)=0$ e a 1 partícula clássica ñ pode ir além deste pto. (ñ tem energia total suf^{te}: p/ $x > x_0$ na fig., seria "en. cinét. <0"). A veloc. da partíc. se anula e troca de sinal em x_0, q se chama ∴ 1 pto. de inversão (ou de reversão ou de retorno) do mov^{to}.



Ex.: oscil. harmôn. clássico: a partíc. oscila entre $+x_0$ e $-x_0$, com $E=\frac{1}{2}kx_0^2 = V(=x_0)$

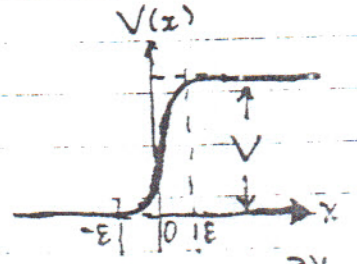
P/ $E<V(x)$, a (5.7) tem sol. c/ índice de refr. imaginário puro:

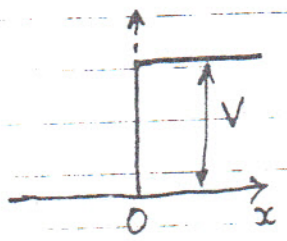
$$\boxed{n = i\kappa \left\{ e^{ink_0x} = e^{-\kappa k_0 x} \right.} \quad [E<V(x)] \quad (5.11)$$

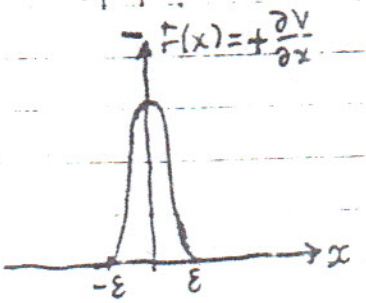
P/ 1 onda, isto significa apenas q, em lugar de oscilar em x, ela se amortece exponencial^{te} ao longo da diz. de "propag.". Na ótica, isto ocorre qdo. 1 onda penetra num meio condutor, onde é absorvida (efeito Joule), mas 1 analogia melhor é c/ 1 onda evanescente na reflexão total, conforme veremos + adiante.

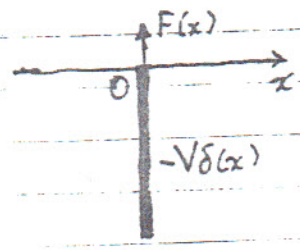
5.2. Degrau de potencial

Mec. Clássica









É o pot.

$$\boxed{V(x)=\begin{cases} 0 & (x<0) \\ V & (x>0) \end{cases}} \quad (5.12)$$

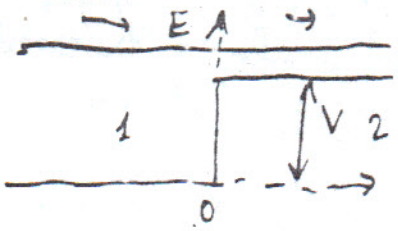
q deve ser pensado como limite de 1 trans. abrupta (fig.). No limite, a força clás. correspondente é 1 força impulsiva

$$\boxed{F(x) = -V\delta(x)} \quad (5.13)$$

q é 1 força deceleradora p/ 1 partíc. q se move da esq. p/ a direita: ao passar pela origem, ela recebe 1 impulso q (classica^{te}) diminui instantanea^{te} sua velocidade.

(a) Região $E > V$

Movim.to clássico

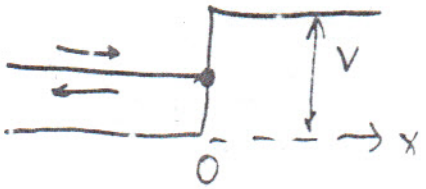


Região 1: $x < 0$ $\rightarrow E = \frac{p_1^2}{2m}$ $\left\{ \boxed{p_1 = \sqrt{2mE}} \right.$

" 2: $x > 0$ $\rightarrow E = \frac{p_2^2}{2m} + V$ $\left\{ \boxed{p_2 = \sqrt{2m(E-V)}} < p_1 \right.$

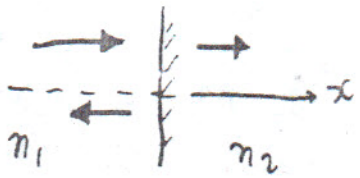
$v_1 = \frac{p_1}{m}$, $v_2 = \frac{p_2}{m}$

Classicam.te, a partic. é freiada da veloc. v_1 p/ $v_2 < v_1$ se ela vai da esq. p/ a direita, e acelerada p/ $v_1 > v_2$ se vem da dir. p/ a esq, supondo $E > V$ (movim.to ilimitado).



(b) Se $E < V$, $x = 0$ é pto. de reversão do movim.to: a partic. vem da esq. c/ momento p_1 e é "refletida" em $x = 0$, passando a ter momento $(-p_1)$.

Ótica



Em termos de ótica, temos 1 onda q incide ⊥te sobre a supf. de separação $x = 0$ entre 1 meio 1 (índice de refr. n_1) e 1 meio 2 (índice n_2).

$E > V \Rightarrow n_2$ real. A onda sofre reflexão e refração, ou seja, é parcialm.te refletida além de ser parcialm.te transmitida. P/ $E < V$ temos reflexão total, como no caso ~~clás~~ d. Mec. Cláss., mas há 1 penetração exponencial (onda evanescente) em $x > 0$, conforme veremos.

$\boxed{E > V}$

MQ

$$\boxed{\begin{aligned} \varphi = \varphi_1 &\rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} + k_1^2 \varphi = 0 \quad (x<0), \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p_1}{\hbar} \\ \varphi = \varphi_2 &\rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} + k_2^2 \varphi = 0 \quad (x>0), \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} = \frac{p_2}{\hbar} \end{aligned}} \qquad (5.15)$$

$E > V$ ⇒ [illegible]

Sols. gerais:

$$\boxed{\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) &= C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} \end{aligned}} \qquad (5.16)$$

P/ obter a sol., temos de especificar conds. de contorno, q incluem o pto. $x = 0$ (onde V é descontínuo), além de cond. no ∞ (p/ $x \to \pm\infty$)

Condr. no ∞: Como no caso clássico, podemos ter 1 partíc. incidente da esq. p/ a direita ou vice-versa; o 1º caso corresp. a $D=0$ e o 2º a $A=0$; o caso geral é 1 superpos. dos 2, e pela simetria do probl. basta considerar a sol. p/ o 1º caso (a do 2º se obtém imediatamte sabendo resolver o 1º).

Logo,

$$\boxed{\begin{aligned}\varphi_1(x) &= A\,e^{ik_1x} + B\,e^{-ik_1x},\\ \varphi_2(x) &= C\,e^{ik_2x},\end{aligned}} \qquad (5.17)$$

q corresponde exatamte ao caso da reflexão e transmissão de 1 onda na ótica. O fator multiplicativo A é arbitrário (a sol. ñ é normalizável; vimos no caso da (4.112) como interpretar o result., p/ ex., em termos de 1 feixe de partícs. incidente.

As 2 sols. indeps. p/ cada E (uma c/ $D=0$ e outra c/ $A=0$) indicam q estes autovalores da energia ($E>V$) são duplamte degenerados, c/ 2 sols. indeps. de mma energia: 1 p/ partíc. incid. da esq. p/ a dir. e outra da dir. p/ a esq., como no caso da (4.112).

Cond. de contorno em $x=0$

Num pto. de descontinuidade x_0 como $x=0$ (V descont. a (4.104) dá

$$\boxed{-\frac{\partial}{\partial t}\int_{x_0-0}^{x_0+0}\rho(x,t)\,dx = j(x_0+0,t) - j(x_0-0,t) = 0} \qquad (5.18)$$

pq ñ deve haver "acumulação" da probabil. num pto. ($\rho \propto \delta(x-x_0)$), ou seja, a dens. de corrente de probab. deve ser contínua; podemos tb. ver isto pensando no degrau como forma limite de 1 pot. contínuo.

Logo, devemos ter

$$\boxed{\begin{aligned}\varphi(x_0+0) &= \varphi(x_0-0),\\ \frac{\partial\varphi}{\partial x}(x_0+0) &= \frac{\partial\varphi}{\partial x}(x_0-0),\end{aligned}} \qquad (5.19)$$

Pela própria eq. ≠ al, $\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}$ permanece sempre finito (embora tenha 1 salto = descont. finita. Logo, $\frac{\partial\varphi}{\partial x}$ tem de ser contínua

ou seja, a função de onda e sua 1ª derivada em rel. a x devem ser contínuas num pto. de descontin. do pot.

Vamos aplicar isto à (5.17)

10ª aula - 16/4

(a) Região E < V

$$\varphi_1(0) = A + B = C = \varphi_2(0)$$
$$\frac{d\varphi_1}{dx}(0) = ik_1(A - B) = ik_2 C = \frac{d\varphi_2}{dx}(0) \qquad (5.20)$$
$$A - B = \frac{k_2}{k_1} C$$

As incógnitas são $\frac{B}{A}$ e $\frac{C}{A}$:

$$2A = \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) C \quad \left\{ \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right. \qquad (5.21)$$

Fração da amplitude transmitida

$$2B = \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) C \Rightarrow \frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \qquad (5.22)$$

Fração da ampl. refletida

Vemos ∴ q, p/ $V \neq 0$, sempre há reflexão, ao contrário da Mec. Cláss.: ∃ sempre 1 probab. $\neq 0$ de q a partícula seja refletida p/ 1 descontinuidade de potencial, o q é 1 efeito puramente quântico (ondulatório).

A dens. de corrente de probab. assoc. c/ a (5.17) é dada pela (4.116):

$$j_1 = v_1 (|A|^2 - |B|^2), \quad v_1 = \hbar k_1/m$$
$$j_2 = v_2 |C|^2, \quad v_2 = \hbar k_2/m \qquad (5.23)$$

(Nota q pela (5.20) é $A^2 - B^2 = \frac{k_2}{k_1} C^2 = \frac{v_2}{v_1} C^2$ { $j_1 = j_2$ (5.24) como garantido pelas cond. de contorno. Pela interpret. física vista,

$$j_1 = j_{inc} + j_{refl} = v_1 |A|^2 - v_1 |B|^2 \qquad (5.24')$$
$$j_2 = j_{trans} = v_2 |C|^2$$

e q dá

$$\text{refletividade} = R = \text{probab. de reflexão} = \frac{-j_{refl}}{j_{inc}} = \left|\frac{B}{A}\right|^2$$
$$\text{transmissividade} = T = \text{"} \quad \text{"} \quad \text{transmissão} = \frac{j_{trans}}{j_{inc}} = \frac{v_2}{v_1}\left|\frac{C}{A}\right|^2 \qquad (5.25)$$
$$R + T = \frac{j_{trans}}{j_{inc}} - \frac{j_{refl}}{j_{inc}} = 1$$

$$\boxed{R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2} \quad (5.26)$$

$$\boxed{T = \frac{v_2}{v_1}\left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{C}{A}\right|^2} \quad (5.27)$$

Note que T não é $|C/A|^2$

$$\therefore \quad T = \frac{k_2}{k_1}\cdot\frac{4k_1^2}{(k_1+k_2)^2} \quad \left\{ \boxed{T = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}} \right. \quad (5.28)$$

R e T são simétricos em $k_1 \leftrightarrow k_2$: O degrau reflete (transmite) igualmente bem dos 2 lados (reciprocidade)

É imediato (verifique!) que $R + T = 1$.

$$\boxed{n_{12} = \frac{k_2}{k_1} \Rightarrow R = \left(\frac{n_{12}-1}{n_{12}+1}\right)^2} \quad (5.29)$$

p/ incid. ⊥

mmo. result. q na ótica. A % gem de reflexão depende da descontinuidade encontrada pela onda: qto. > fôr a descont. > a reflexão.

$$(5.15) \quad \boxed{(n_{12}) = \left(\sqrt{1 - \frac{V}{E}}\right)^2} \quad (5.30)$$

$\therefore$, p/ $E \gg V$ (V = pequena perturb.) é $n_{12} \approx 1$ e $R \to 0$ (limite de altas energias; a partícula se comporta ≈ te como livre); p/ $E = V + \varepsilon$, $\varepsilon \ll V$, tem-se $n_{12} \ll 1$ e $R \to 1$: a reflexão tende a tornar-se total (descontin. forte, p/ ex. na velocidade: a partícula é forte^te decelerada, passando a 1 veloc. mto. + lenta).

(b) Região $0 \leq E < V$

Neste caso, a sol. continua valendo, c/

$$\boxed{k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar} = \pm i\,\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar} = \pm i\,|k_2|} \quad (5.31)$$

Mas isto dá

$$\varphi_2(x) = C e^{ik_2x} \longrightarrow C e^{\mp|k_2|x}$$

e o sinal inferior corresp. a 1 exponencial crescente p/ $x \to \infty$, q ñ só ñ é normalizável (afinal, $e^{\pm ik_2x}$ tb. ñ era), mas ñ é " no senso do do espectro contínuo, em termos de dens. de prob. a "probab. relativa" seria de q a partícula estaria no ∞ e certeza

Logo, só 1 sinal é aceitável:

$$\boxed{k_2 = i|k_2| \Rightarrow \varphi_2(x) = C e^{-|k_2|x} = C e^{-\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}x}} \quad (5.32)$$

Na região 1, k_1 continua real, de modo q a expressão p/ j_1 na (5.23) " válida, e $R = |B/A|^2$.
Pela (5.27),

$$\boxed{\frac{B}{A} = \frac{k_1 - i|k_2|}{k_1 + i|k_2|} = e^{-2i\eta} \left\{ \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1 \right.} \quad (5.33)$$

$= e^{-2i\eta}$

de modo que

$$\boxed{R = 1} \quad (5.34)$$ reflexão total

se

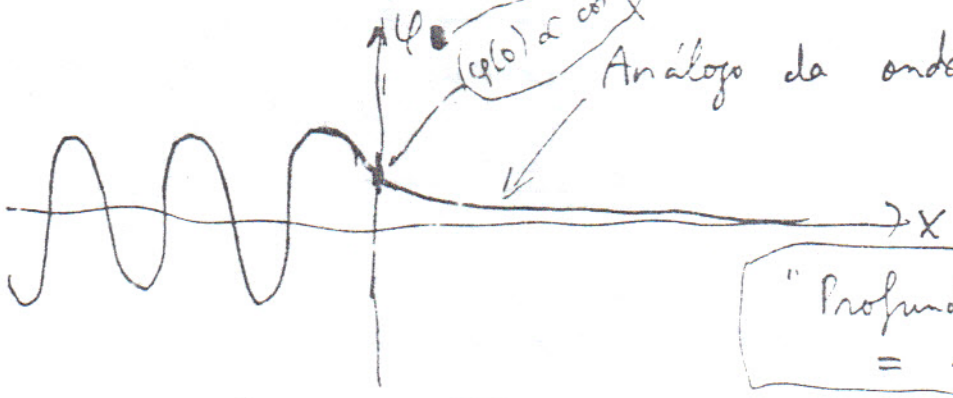
$$\varphi_1(x) = A\left[e^{ik_1x} + e^{-i(k_1x+2\eta)}\right] = Ae^{-i\eta}\left[e^{i(k_1x+\eta)} + e^{-i(k_1x+\eta)}\right]$$

$$\Rightarrow \boxed{\varphi_1(x) = 2Ae^{-i\eta}\cos(k_1x+\eta)} \quad (5.35)$$

= onda estacionária. Pela (5.23),

$$\boxed{j_1 = 0} \quad (5.36)$$

$$(5.37) \left\{ \boxed{\frac{\partial\varphi_2}{\partial x} = -|k_2|\varphi_2 \left\{ \varphi_2^*\frac{\partial\varphi_2}{\partial x} - \varphi_2\frac{\partial\varphi_2^*}{\partial x} = 0 \right\} j_2 = 0} \right.$$



Análogo da onda evanescente na refl. total: penetração exponencial

"Profundidade de penetração" $= 1/|k_2| = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E)}}$

Temos ∴ 1 distrib. de probab. c/ densidade $\neq 0$ de encontrar a partícula p/ $x > 0$ (região clarificat. proibida), embora esta probab. seja extremamente pequena.

A "profund. de penetr." (5.38) é tbc. < ...

11ª aula - 23-4

fô a ~~tça V-E~~.

Limite $V \to \infty$ = "parede ∞"

Neste limite, $|k_2| \to \infty$ e a profundidade de penetração é 0. Ao mmo tpo., a (5.33) dá

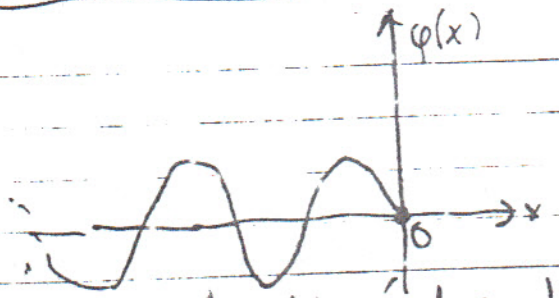
$$\boxed{\frac{B}{A} \to -1 \quad \left\{ \varphi_1(x) \to 2iA\,\mathrm{sen}(k_1 x) \right.} \quad (5.39)$$

o q dá a cond. de contorno

$$\boxed{\psi(0,t) = 0} \quad (5.40)$$

(Cond. de Dirichlet)

Cond. de contorno de parede impenetrável



e temos

$$\boxed{\psi(x,t) = 0 \ \forall\, x \geq 0} \quad (5.41)$$

Note q neste caso limite a derivada 1ª é descontínua (pela eq. de Schröd., $\partial^2\psi/\partial x^2 \to \infty$ p/ $x \to 0$).

Note que, p/ $0 \leq E \leq V$, ñ pode haver 1 partíc. vindo da direita, de modo q é sempre $D=0$ na (5.16). Logo, nesta região do espectro contínuo de energia, ñ há degenerescência (a dupla degenerescência só aparece p/ $E > V$). Em ambos os casos o espectro contínuo.

Probl. 24. Mostre que uma autofunção p/ $E < 0$, caso existisse, teria que ser da forma

$$\boxed{\varphi(x) = \begin{cases} G\, e^{\lambda_1 x} & (x < 0) \\ H\, e^{-\lambda_2 x} & (x > 0) \end{cases}} \quad (5.42)$$

onde

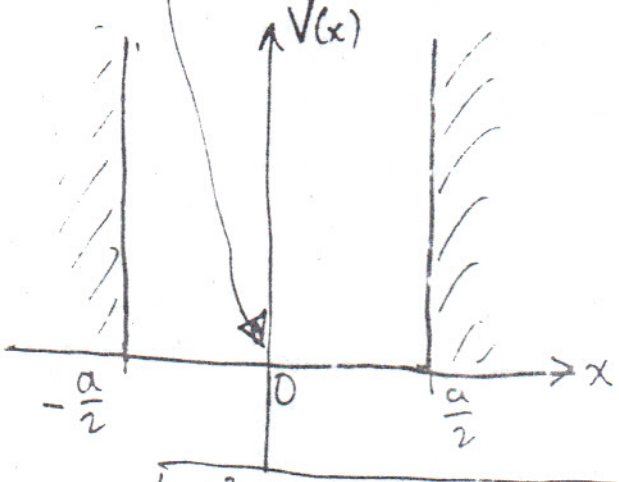
$$\boxed{\lambda_1^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \quad \lambda_2^2 = \frac{2m(V-E)}{\hbar^2},} \quad (5.43)$$

mas q é impossível satisfazer as cond. de contorno p/ 1 sol. deste tipo

Escolha conveniente da origem

5.3. Partículas confinadas

(a) Partícula numa caixa (de compr. a)



$$V(x) \begin{cases} = 0 & \left(-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}\right) \\ \to \infty & \left(|x| > \frac{a}{2}\right). \end{cases}$$

(Paredes impenetráveis)

Classicam.te, a partíc. se move livre dentro da caixa c/ $\forall$ energia E e é refletida nas paredes ($x = \pm \frac{a}{2} \equiv$ ptos. de inversão).

$$\boxed{\frac{d^2\varphi_E}{dx^2} + k^2\varphi_E(x) = 0, \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E = \text{const.}} \quad (5.44)$$

$\therefore$

$$\boxed{\varphi_E(x) = A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx}} \quad (5.45)$$

c/ as conds. de contorno

$$\boxed{\varphi_E\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0} \quad (5.46)$$

$$\boxed{e^{ika/2} = z \quad ; \quad e^{-ika/2} = z^*} \longrightarrow = \frac{1}{z} \quad (5.47)$$

$\therefore$

$$\begin{array}{l} x = +\frac{a}{2} \\ x = -\frac{a}{2} \end{array} \boxed{\begin{array}{l} zA + z^*B = 0 \\ z^*A + zB = 0 \end{array}} \quad (5.48)$$

P/ q $\exists$m sols. $\neq$s da trivial p/ A e B, tem de ser

$$\boxed{0 = \begin{vmatrix} z & z^* \\ z^* & z \end{vmatrix} = z^2 - z^{*2} = e^{ika} - e^{-ika} = 2i\,\text{sen}(ka)}$$

e q só é possível p/

$$k = k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (n \neq 0 \text{ inteiro}) \qquad (5.50)$$

pois $n=0$ daria somente a sol. trivial $A - B = 0$.

$$\therefore \quad z = e^{in\frac{\pi}{2}} = \begin{cases} \pm 1 & (n \text{ par}) \\ \pm i & (n \text{ ímpar}) \end{cases} \qquad (5.51)$$

$$\underline{n \text{ par}} \Rightarrow \text{nas (5.48)} \; z = z^* \begin{cases} A + B = 0 \\ A - B = 0 \end{cases} \begin{cases} A = -B \\ A = B \end{cases} \qquad (5.52)$$

$$\underline{n \text{ ímpar}} \Rightarrow z = -z^*$$

o q dá as autofunções

$$\begin{cases} n \text{ ímpar} \longrightarrow \varphi_{E_n}(x) = N_n \cos(k_n x) \\ n \text{ par} \longrightarrow \varphi_{E_n}(x) = N'_n \operatorname{sen}(k_n x) \end{cases} \qquad (5.53)$$

N_n, N'_n = fatores de normaliz.

c/ autovalores da energia

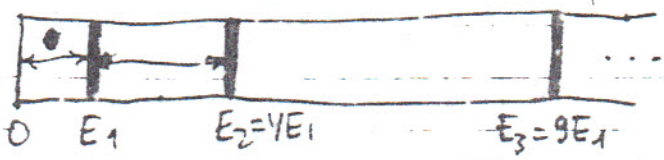
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \quad (n = 1, 2, 3, \ldots) \qquad (5.54)$$

pois $n < 0$ não dá sols. novas (cf. (5.53)).

Propriedades das soluções

(i) Espectro discreto

Ao contrário do caso clássico, em q $\forall E \geq 0$ é possível, a energia é quantizada, assumindo somente os valores discretos (5.54); q dão os níveis de energia do sist.



O espectro discreto é característico do confinamento (cf. + adiante).

(ii) "Energia de incerteza"

Em particular, a energia mínima q a partícula pode ter é

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2} \qquad (5.55)$$

Como as paredes são impenetráveis, a presença da partíc. entre elas garante que

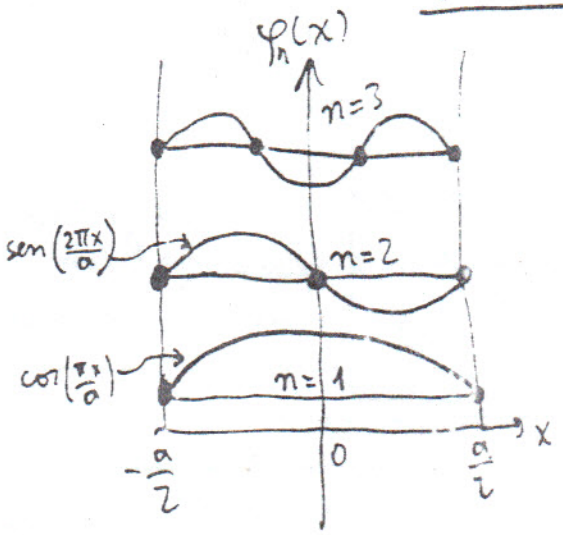
$$\Delta x \leq a \qquad (5.56)$$

Logo:

$$\boxed{\Delta p \gtrsim \frac{\hbar}{a} \Longrightarrow \frac{(\Delta p)^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2ma^2}} \quad (5.57)$$

o q é satisfeito pela (5.55): podemos atribuir a Eia da energia mínima (no caso, pura de cinética, pq $V=0$ dentro) à relação de incerteza.

(iii) Autofunções



Sãs análogos aos (dois) modos normais de vibração de 1 corda vibrante presa nas extremidades. As ondas estacionárias corresps. formam 1 conjº discreto, devido ao confinamº (em + de 1 dim.: membranas vibrantes, cavidades ressonantes).

(iv) Ortonormalidade

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \begin{matrix}\cos^2 \\ \operatorname{sen}^2\end{matrix}\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = \frac{1}{2}\underbrace{\int_{-\frac{a}{2}}^{a/2} dx}_{=a} \pm \frac{1}{2}\underbrace{\int_{-\frac{a}{2}}^{a/2} \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)dx}_{\propto \operatorname{sen}\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\Big|_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} = 0} = \frac{a}{2}$$

$$\therefore \boxed{N_n^{+} = N_n^{-} = \sqrt{\frac{2}{a}}} \quad (5.58)$$

(normalização).

C/ esta normaliz. a (5.53) formam 1 conj. ortonormal, e sabemos q ∀ função de onda $\psi(x)$ tal que

$$\boxed{\psi\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0} \quad (5.59)$$

tem 1 expansão da forma (Série de Fourier)

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ a_m \cos\left[\frac{(2m-1)\pi}{a}x\right] + b_m \operatorname{sen}\left[\frac{2m\pi}{a}x\right] \right\}$$

onde os coefs. se obtêm pela ortonormalidade.

(v) Número de nós

Não contando os nós nos extremos $\pm a/2$:

- O "estado fundamental" não tem nós ($n=1$)
- O "estado excitado" de energia E_n ($n \geq 2$) tem $(n-1)$ nós [$(n-1)$-ésimo estado excitado].

(vi) Paridade

O "potencial" $V(x)$ (c/ a escolha q fizemos da origem) tem a propriedade

$$\boxed{V(-x) = V(x)} \quad (5.61)$$

(função par), de modo q, na eq. de Schröd. de estados estac., se $\varphi_E(x)$ é sol. da eq., $\varphi_E(-x)$ tb. é, c/ o mmo. valor da energia E. Logo, se ñ há degenerescência, tem de ser

$$\boxed{\varphi_E(-x) = \lambda\, \varphi_E(x)} \quad (5.62)$$

como é o caso aqui

a degeneresc., as φ_2 são 2 ps. indep. mmo. autov. E,

$x \to -x$

$$\varphi_E(x) = \lambda\, \varphi_E(-x) = \lambda^2 \varphi_E(x) \left\{ \boxed{\lambda = \pm 1} \right. \quad (5.63)$$

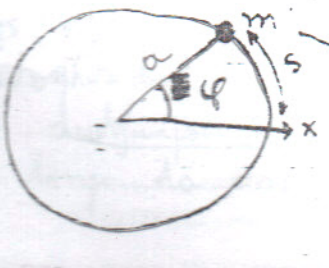
ou seja, temos de ter, necessariamte.,

$$\boxed{\varphi_E(-x) = \begin{cases} +\varphi_E(x) & \text{(função par)} \\ \text{ou} & \\ -\varphi_E(x) & \text{(" ímpar)} \end{cases}} \quad (5.64)$$

q acontece, precisamte., c/ as autofunções (5.53). Vemos q 1 propr. de invariância da eq. de Schröd. (p/ a transf. $x \to -x$) se traduz por 1 propr. de simetria das autofunções (paridade), o q é 1 resultado bem + geral.

(b) Partícula sobre 1 círculo

É 1 sistema quânt. q corresponde classicamte. a uma conta vinculada a deslizar sobre 1 anel (aro) circular de raio a. A coord. q corresponde a x é o arco de círculo (p/ 1 partíc. na posição



da fig.

$$\boxed{s = a\,\varphi} \quad (5.65) \quad \longleftrightarrow x$$

de modo q o operador "momento linear" ao longo da circunferência é

$$\hat{p}_\varphi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial s} = -\frac{i\hbar}{a}\frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad (5.66)$$

e a Hamiltoniana da partíc. "livre" ao longo do círculo é

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_\varphi^2 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \qquad (5.67)$$

Os pontos φ e $\varphi + 2p\pi$, $p = \pm 1, \pm 2, \ldots$, correspondem à mesma posição, de modo q esperamos ter a condição de contorno periódica

$$\psi(\varphi + 2p\pi) = \psi(\varphi) \quad (p = \pm 1, \pm 2, \ldots), \qquad (5.68)$$

mostrando q a coordenada da partícula pode ser confinada ao intervalo $0 \leq \varphi < 2\pi$

(i) Autovalores e autoestados de $\hat{p}_\varphi$

$$\hat{p}_\varphi \psi = -\frac{i\hbar}{a}\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \lambda \psi \qquad (5.69)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \frac{i\lambda a}{\hbar}\psi \quad \left\{ \psi_\lambda(\varphi) = N \exp\left(\frac{i\lambda a}{\hbar}\varphi\right) \right. \qquad (5.70)$$

(N: normalizj.)

$$\psi_\lambda(\varphi + 2\pi) = \psi_\lambda(\varphi) \cdot \underbrace{\exp\left(\frac{2\pi i a}{\hbar}\lambda\right)}_{= 1 \text{ pela } (5.68)}$$

$\psi(\varphi)_n$ $\quad = 2\pi n$

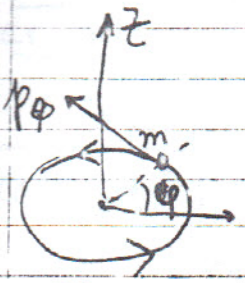
$$\Rightarrow \quad \lambda = \lambda_n = n\frac{\hbar}{a} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots) \qquad (5.71)$$

As autofunções normalizadas

$$\psi_n(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \quad (n = 0, \pm 1, \ldots) \qquad (5.72)$$

(De fato: $\int_0^{2\pi} |\psi_n(\varphi)|^2 d\varphi = 1$)

(ii) Momento angular



Por analogia c/ o caso clássico, o operador momento ∡r em rel. ao eixo z (fig.) é

$$\boxed{\hat{l}_z = a\,\hat{p}_\varphi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}} \quad (5.73)$$

Temos

$$\boxed{\hat{l}_z\,\psi_n(\varphi) = n\hbar\,\psi_n(\varphi) \quad (n = 0, \pm 1, \ldots),} \quad (5.74)$$

de modo q os autoestados (5.72) são tb. autoestados do momento ∡r. Vemos q o momento ∡r é quantizado em unidades de $\hbar$, como no caso do mom. ∡r do fóton (2.53). A ≠ça é q o atual é mom. ∡r orbital, assoc a 1 coordenada ∡r θ do movi.to da partícula, ao passo q o do fóton é 1 mom. ∡r intrínseco (ou de spin), q ñ está assoc. a 1 coordenada ∡r do fóton, mas ao fato de q ele é 1 partícula de natureza vetorial (assoc. ao cpo. emco), ou seja, c/ "graus de liberdade intrínsecos".

(iii) Estados estacionários

Como $\hat{H} = \frac{1}{2m\underbrace{a^2}_{=I}}\hat{l}_z^2$ as (5.72) são autofunções de $\hat{H}$, com

$= I$ = momento de inércia da partíc em rel. ao centro

$$\boxed{\hat{H}\,\psi_n(\varphi) = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2ma^2}\,n^2}_{E_n}\,\psi_n} \quad (5.75)$$

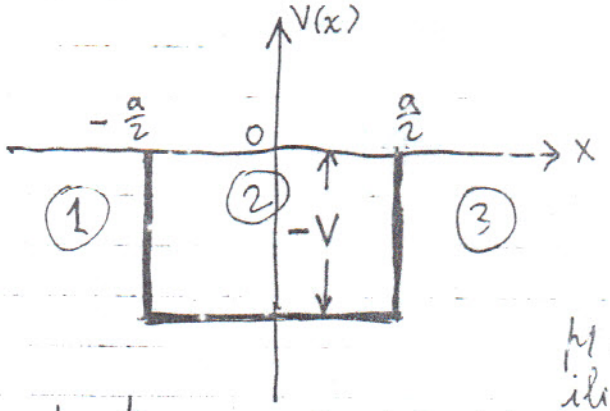
(só difere da (5.54) pelo fator π^2)

q só ~~difere~~ depende de n^2. Logo, cada autovalor da energia é duplamente degenerado, c/ ψ_n e ψ_{-n} como autofunções indeps. corresps. ao mmo. autovalor o q corresp. aos 2 sentidos opostos de percurso do círculo (como p e −p ao longo da reta). ∀ comb. linear de ψ_n e ψ_{-n} = autoest.

Em partic., $\psi_n \pm \psi_{-n}$, proporcionais a $\cos(n\varphi)$ e $\mathrm{sen}(n\varphi)$, são autofunções de $\hat{H}$ q não são autoestados do momento $\hat{p}_\varphi$. Tomadas desta forma, as autofunções ~~[illegible]~~ da energia têm nós ao longo do círculo ($0 \leq \theta < 2\pi$) cujo nº aumenta c/ a energia.

11ª aula - 18/4

5.4. Poço quadrado (retangular): estados ligados

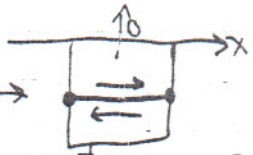


O poço quadr. é o pot.

$$V(x) = \begin{cases} -V & (|x| < \frac{a}{2}) \quad (V>0) \\ 0 & (|x| > \frac{a}{2}) \end{cases} \tag{5.76}$$

Classicamente, há 2 regiões permitidas p/ o movto: $E > 0 \Rightarrow$ movto ilimitado, caso q estudaremos + adiante, e $E < 0$ (c/ respeito ao zero de energia escolhido, q é p/ que seja $V = 0$ p/ $x \to \pm\infty$), qdo a região clássica permitida é "dentro" do potencial, cf $E > V(x)$ (cf. (5.9)), ou seja, $E > -V$:

$$-V < E < 0 \tag{5.77}$$



Neste caso, a partícula fica oscilando entre os 2 ptos de retorno, cf energia E ∀ entre os 2 extremos da (5.77).

Podemos comparar c/ 1 bolinha numa depressão do terreno: cf energia insuf.te p/ sair do "poço", q fica oscilando entre os extremos.

Temos agora 3 regiões ≠s; cf ≠s valores de k:

$$k_2 = \sqrt{2m[E - V(x)]}/\hbar = \sqrt{2m\underbrace{(E+V)}_{>0}}/\hbar \equiv k \tag{5.78}$$

omitiremos o índice 2

e

$$k_1 = k_3 = \sqrt{2mE}/\hbar \equiv iK \equiv i\sqrt{2m|E|}/\hbar \tag{5.79}$$

($E < 0$)

cf as sols. gerais:

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} = Ae^{-Kx} + Be^{Kx} \\ \varphi_2(x) &= Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \\ \varphi_3(x) &= Ee^{ik_3x} + Fe^{-ik_3x} = Ee^{-Kx} + Fe^{Kx} \end{aligned} \tag{5.80}$$

às quais é preciso aplicar as cond.s de contorno.

Conds. no ∞: P/ normalizabilidade de ψ, temos de excluir as sols. exponencial^{te} crescentes no ∞, o q exige:

$$\boxed{A = F = 0} \quad (5.81)$$

reduzindo as (5.80) a

$$\boxed{\begin{aligned} \varphi_1 &= B e^{\kappa x} \\ \varphi_2 &= C e^{ikx} + D e^{-ikx} \\ \varphi_3 &= E e^{-\kappa x} \end{aligned}} \quad (5.82)$$

ou seja, a função de onda tem de ser exponencial^{te} decrescente nas regiões 1 e 3 (análogo da onda evanescente).

Conds. em $x = \pm a/2$: Continuidade de φ e $d\varphi/dx$.

Em $-a/2$:

$$\boxed{\begin{aligned} B e^{-\kappa a/2} &= C e^{-ika/2} + D e^{+ika/2} \\ \kappa B e^{-\kappa a/2} &= ik(C e^{-ika/2} - D e^{+ika/2}) \end{aligned}} \quad (5.83)$$

Em $+a/2$:

$$\boxed{\begin{aligned} C e^{ika/2} + D e^{-ika/2} &= E e^{-\kappa a/2} \\ ik(C e^{ika/2} - D e^{-ika/2}) &= -\kappa E e^{-\kappa a/2} \end{aligned}} \quad (5.84)$$

que são 4 eq^{s}. lins. homogêneas nas 4 incógnitas B, C, D, E. P/ q tenham sol. $\neq$ da trivial, o determinante terá de ser $= 0$, o q dá a cond. de autovalores. 12ª aula - 25.04

Em lugar de calcular direta^{te} o determinante, é + simples resolver as (5.83) em rel. a C e D, e o mmo. p/ as (5.84).

$$\boxed{z = \underbrace{e^{ika/2}}_{=1/z^*}, \quad z^* = \underbrace{e^{-ika/2}}_{=1/z}; \quad \zeta = e^{-\kappa a/2}} \quad (5.85)$$

$$\boxed{\begin{cases} z^* C + z D = \zeta B \\ z^* C - z D = -i\frac{\kappa}{k}\zeta B \end{cases}} \quad (5.86)$$

$$\therefore \quad \begin{aligned} 2z^* C &= \left(1 - i\tfrac{\kappa}{k}\right)\zeta B \\ 2z D &= \left(1 + i\tfrac{\kappa}{k}\right)\zeta B \end{aligned} \quad \boxed{\begin{aligned} C &= \tfrac{1}{2}\left(1 - i\tfrac{\kappa}{k}\right)\zeta z B \\ D &= \tfrac{1}{2}\left(1 + i\tfrac{\kappa}{k}\right)\zeta z^* B \end{aligned}} \quad (5.87)$$

Analogamte:

$$\boxed{\begin{aligned} z\,C + z^* D &= \zeta E \\ z\,C - z^* D &= +i\frac{K}{k}\zeta E \end{aligned}} \quad (5.88)$$

o q só difere da (5.86) por: $z \leftrightarrow z^*$, $K \to -K$; $B \to E$.
Logo,

$$\boxed{\begin{aligned} C &= \frac{1}{2}\left(1+\frac{iK}{k}\right)\zeta z^* E \\ D &= \frac{1}{2}\left(1-i\frac{K}{k}\right)\zeta z\, E \end{aligned}} \quad (5.89)$$

A razão C/D tem de ser a mma. nos 2 casos, o q dá a cond. de consistência:

$$\boxed{\frac{C}{D} = \left(\frac{k-iK}{k+iK}\right)\frac{z}{z^*} = \left(\frac{k+iK}{k-iK}\right)\frac{z^*}{z}} \quad (5.90)$$

ou seja

$$\left(\frac{\overbrace{k-iK}^{-i(K+ik)}}{\underbrace{k+iK}_{i(K-ik)}}\right)^2 = \left(\frac{z^*}{z}\right)^2 = e^{-2ika}$$

$$= -\frac{\left(\frac{K}{k}+i\right)}{\left(\frac{K}{k}-i\right)}$$

o q tb. podemos escrever

$$\boxed{\left(\frac{K-ik}{K+ik}\right)^2 = e^{2ika}} \quad (5.91)$$

$k = \sqrt{2m(E+V)}/\hbar$
$K = \sqrt{2m|E|}/\hbar$

q é 1 eq. transcendente, cujas raízes em E dão os autovalores.
Tomando a $\sqrt{\ }$ de ambos os mbros, temos 1 duplo sinal; ∴ há 2 possibils.:

(a) Sinal –

$$\boxed{\frac{K-ik}{K+ik} = -e^{ika} = \frac{K/k - i}{K/k + i} = -z^2} \Longrightarrow \quad (5.92)$$

$$= -\frac{z}{z^*}$$

$$\Rightarrow \frac{K}{k} - i = -z^2\frac{K}{k} - iz^2 \quad \left\{ \frac{K}{k}(1+z^2) = -i(z^2-1) \right.$$

$$\Rightarrow \frac{K}{k} = \frac{z^2-1}{i(z^2+1)} = \frac{z-\frac{1}{z}}{i\left(z+\frac{1}{z}\right)} = \frac{\left(e^{ika/2} - e^{-ika/2}\right)/i}{e^{ika/2} + e^{-ika/2}}$$

o q dá:

$$\boxed{\frac{K}{k} = \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right)} \quad (5.93)$$

$$\frac{K^2}{k^2} = \frac{|E|}{E+V} \left\{ 1 + \frac{K^2}{k^2} = \frac{E+|E|+V}{E+V} = \frac{V}{E+V} = 1 + \operatorname{tg}^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{1}{\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)} \right.$$

ou seja, cf

$$\boxed{k_0 = \sqrt{2mV}/\hbar \quad (= k \text{ p/ } E=0)} \quad \boxed{\left(k_0^2 = k^2 + K^2\right)} \quad (5.94)$$

$$\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{k^2}{k_0^2} \left\{ \boxed{\begin{array}{l} \left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \\ \text{cf } \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \text{ pela (5.93)} \end{array}} \right. \quad (5.95)$$

onde $E \leq 0 \Rightarrow E \geq -V$ $\Rightarrow$ $\boxed{0 \leq k \leq k_0}$ p/ evitar raízes espúrias.

(b) Sinal + (Deixar como exercício)

$$\boxed{\frac{\frac{K}{k} - i}{\frac{K}{k} + i} = + e^{ika} = + z^2} \quad (5.96)$$

$= \frac{z}{z^*}$

$$\therefore \quad \frac{K}{k} = \frac{-z^2 - 1}{i(1 - z^2)} = + \frac{z + \frac{1}{z}}{i\left(z - \frac{1}{z}\right)} = \frac{\cos\left(\frac{ka}{2}\right)}{-\operatorname{sen}\left(\frac{ka}{2}\right)}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{K}{k} = -\cot\left(\frac{ka}{2}\right)} \quad (5.97)$$

$$\boxed{\frac{k^2 + K^2}{k^2} = \frac{k_0^2}{k^2} = 1 + \cot^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{1}{\operatorname{sen}^2\left(\frac{ka}{2}\right)}} \quad (5.98)$$

ou seja,

$$\boxed{\begin{array}{l} \left|\operatorname{sen}\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \\ \text{cf } \operatorname{tg}\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 \leftarrow \text{pela (5.97)} \end{array}} \quad (5.99)$$

$$\boxed{0 \leq k \leq k_0}$$

No 1º caso, levando a (5.92) na (5.90), vem

$$\boxed{\begin{aligned} C &= D \quad (\text{caso da (5.95)}) \\ D &= -C \quad (\text{" " (5.99)}) \end{aligned}} \qquad (5.100)$$

~~$C = |C| e^{i\delta}$~~

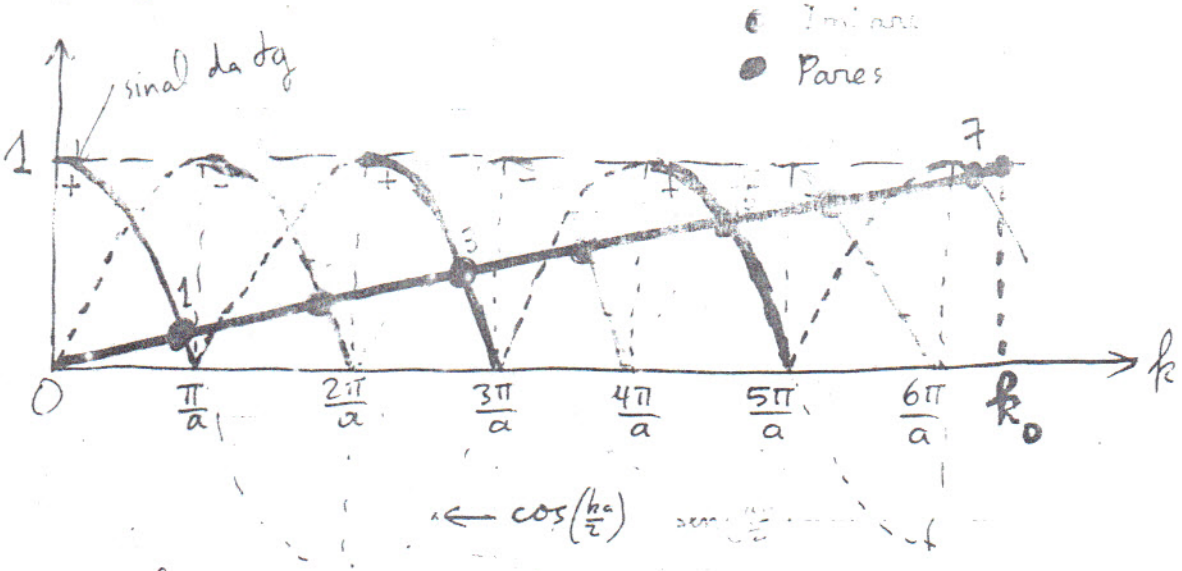
~~(5.80) $C = D \Rightarrow \varphi_2(x) = |C| e^{i\delta} (e^{ikx} + e^{-ikx})$~~ (5.101)

$$\boxed{(5.80)\left\{ \varphi_2(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \right. \quad \begin{cases} C = D \Rightarrow \varphi_2(x) = 2C\cos(kx) \\ D = -C \Rightarrow \varphi_2(x) = 2iC\,\mathrm{sen}(kx) \end{cases}}$$

(5.101)

∴ os 2 tipos de sols. correspondem a autoestados pares e ímpares, respectivamte, o q concorda cl a disc. anterior, hq. a (5.91) vale: $V(-x) = V(x)$.

Pela (5.95), os autovalores pares podem ser obtidos graficamte como intersecções da |cosenóide| $\left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$ com a reta k/k_0 que liga a origem ao pto. $(k_0, 1)$; e daí q a $\mathrm{tg}(ka/2)$ é > 0; os ímpares, idem da senóide $\left|\mathrm{sen}\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$, cl " < 0.



No caso da fig., em que $k_0 a$ está entre 6π e 7π, temos 7 intersecções, correspondendo a 4 autoestados pares e 3 ímpares

Probl. 25. Obtenha os estados ligados ímpares

Propr. dos estados ligados

(i) Como é característico de ondas confinadas, o conj. de autovalores é discreto: o espectro de estados ligados é discreto.

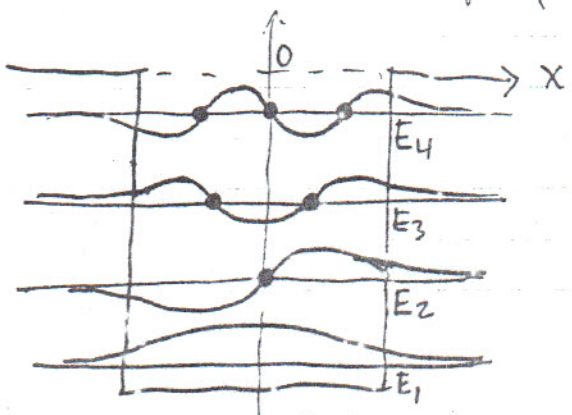
(ii) Para $|x| \to \infty$, $|\psi|^2$ decresce exponencialte: a probab. de encontrar a partic. na região classicate proibida $|x| > \frac{a}{2}$ é muito pequena.

(iii) O nº de estados ligados é

$$\boxed{N = \left[\frac{k_0 a}{\pi}\right] + 1 = \left[\frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{2mVa^2}\right] + 1} \quad (5.102)$$

onde $[x] =$ > inteiro contido em x. Note q só depende da profundidade V do pot. e de seu alcance a através da combinação Va^2 (importante em fís. nucl. de baixa energia). Sempre há no mínimo 1 estado ligado ($\forall V$)

(iv) As funções de onda são alternadate pares e ímpares, e a função de onda do nº estado ligado ($n=1$ p/ o estado fundam.) tem $(n-1)$ nós (por isto, o estado fundam. tem de ser par).



(v) P/ $V \to \infty$ (poço ∞te profundo) e tb. $k_0 = \sqrt{2mV}/\hbar \to \infty$, de modo q a reta da fig. da pg. ao lado $\to$ tornar-se horizontal, e as intersecções ocorrem em $k_n a = n\pi$: recuperamos os estados da partícula numa caixa (cf. (5.54)): a única $\neq$ça é a escolha do nível zero de energia.

(vi) P/ o estado fundam., c/ $\varphi_{1,3}(x) \sim e^{-K|x|}$, a incerteza em posição é $\Delta x \sim \frac{1}{K}$, q pode ser arbitrariate gde. p/ E suffte. pequeno; logo, Δp pode ser tão peq. qto. se queira, o q explica pq. sempre há ($\forall V$) 1 estado ligado

Discussão qualitativa

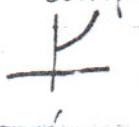
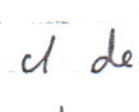
H 1 pot. geral $\varphi(x)$

$$\boxed{\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2(x)\varphi = 0 \qquad k^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]} \quad (5.103)$$

$E < V(x)$ (região proibida) $\Rightarrow$ $k^2 < 0$

$\frac{\varphi''}{\varphi} = -k^2 > 0 \Rightarrow$ gráfico de $\varphi(x)$ tem a convexidade voltada p/ o eixo

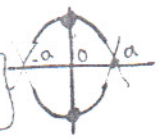
[como a parábola $\varphi = \pm(x^2 + a^2)$, $\varphi''(0)/\varphi(0) = \frac{\pm 2}{\pm a^2} = \frac{2}{a^2} > 0$ no pto $x = 0$]

logo, tem comportº tipo exponencial: combin. de expon. crescente  c/ decrescente  . Se a região se estende até ∞, só a exponencial decrescente no ∞ deve sobreviver.

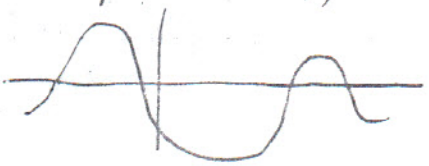
$E > V(x)$ (região permitida) $\Rightarrow$ $k^2 > 0$

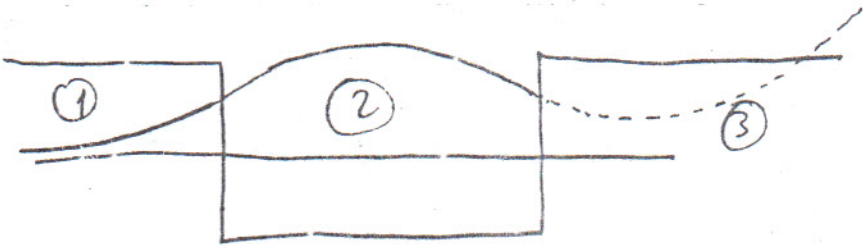
$\frac{\varphi''}{\varphi} = -k^2 < 0 \Rightarrow$ gráfico de $\varphi(x)$ tem a concavidade voltada p/ o eixo

dando + curva qdo. $> E - V(x)$ (oscila + rapido $\pm$)

[como a parábola $\varphi = \pm(x^2 - a^2)$, $\varphi''(0)/\varphi(0) = -2/a^2 < 0$ ]

Enquanto isso persiste (i.é, p/ $x \in$ região permitida), leva a 1 comportº tipo oscilatório, como 1 combin. de cos + sen, c/ nós →





Começando em ① c/ 1 sol. tipo expon. decrescente ($E < 0$), ela tem concav. p/ o eixo em ②, mas em geral ($p/\ \forall E$) se casa c/ 1 combin. de expon. decresc + crescente em ③. Só p/ valores especiais de E (estds. ligados) terá 1 coef. $\neq 0$ em $x = +\frac{a}{2}$ q casa c/ 1 expon. pura decrescente.

$(\psi = 0 \text{ H } r = 0)$ ← Em 3-D, ∃ 1 valor de V mínimo p/ aparecer o 1º est. ligado. (Analogia cl estados impares)

A 1ª vez q isto acontece (estado fundamental) a curvatura em ② é insuf.te p/ haja nós.

12ª aula - 25/4

Relação c/ o princípio de incerteza: P/ localizar a perdiz dentro do poço, temos de ter $\Delta x \leq a$

$\Rightarrow \Delta p \gtrsim \frac{\hbar}{a}$ ∴ $\frac{(\Delta p)^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2ma^2}$. P/ ter 1 autoestado de energia total < 0 (ligado), isto exige q a energia potencial (de ligação) $-V$ seja tal que

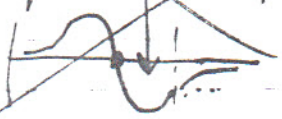
$$-V + \frac{\hbar^2}{2ma^2} < 0 \quad \left\{ \boxed{V \gtrsim \frac{\hbar^2}{2ma^2}} \right. \quad (5.105)$$

Pelos [illegible] ligado ($n=4$) aparece p/

$$\boxed{\frac{2mVa^2}{\hbar^2} \geq \pi^2} \quad (5.106)$$

q é consistente c/ a (5.105). Vemos ∴ a importância da "energia de incerteza".

Daí em diante, a curvatura aumenta e precisa introduzir + 1 nó antes de ter outra sit. favorável p/ 1 est. ligado, e assim por diante.

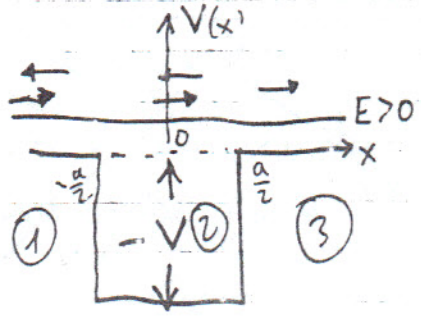


5.7 Poço de barreira quadrada [illegible]

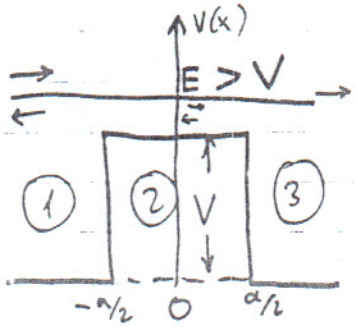
O dêuteron é 1 estado ligado N+P, cl energia de ligação mto pequena ($\simeq 2{,}2$ MeV) comparada cl a profundidade V do "poço quadrado equivalente" das forças nucleares, de modo que é quase como a situação em q apenas acabou de aparecer o 1º est. ligado. A massa m neste caso é a massa reduzida do sist. de 2 corpos, $m \approx M_p/2$ (M_p = massa do próton ≈ massa do nêutron)

Prob. 2º. Estime V p/ as forças nucleares, sabendo que a (alcance) $\sim 3 \times 10^{-13}$ cm e que V é (≃apenas) suf.te p/ ligar o dêuteron.

5.5. Espectro contínuo (poço ou barreira)



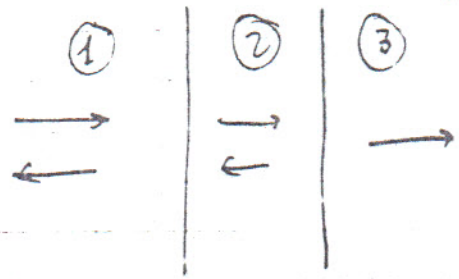
ou



Nos 2 casos, movt ilimitado, cl reflexão parcial

P/ passar do 1º caso ao 2º, basta fazer $V \to -V$ e $E > V$.

Análogo ótico: Lâmina de faces //s, incidência ⊥



$$n = n_{12} = \frac{n_2}{n_1} = \frac{k_2}{k_1} = \frac{\sqrt{2m[E-V(x)]/\hbar}}{\sqrt{2mE}/\hbar}$$

$$n_{\bullet} = \begin{cases} \sqrt{1+\frac{V}{E}} \ (>1) \to \text{poço} \\ \sqrt{1-\frac{V}{E}} = \sqrt{\frac{E-V}{E}} \ (<1) \to \text{barreira} \end{cases} \quad (5.107)$$

No 1º caso (poço), a partíc., na Mec. Clás., é acelerada (veloc. >) dentro do poço; no 2º, é ~~acelerada~~ freiada (" <) " da barreira.

Sejam (± da notação anterior (5.94))

$$k_1 = k_3 \equiv k_0$$
$$k_2 \equiv k \ (= n_{\bullet} k_0) \quad (5.108)$$

$$\varphi_1(x) = A e^{ik_0 x} + B e^{-ik_0 x}$$
$$\varphi_2(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx}$$
$$\varphi_3(x) = E e^{ik_0 x} \quad (5.109)$$

Conds. de contorno: $z_0 = e^{ik_0 a/2}$; $z_0^* = \frac{1}{z_0}$ (5.110)

~~$z = e^{ika/2}$~~ ; $z = e^{ika/2}$; $z^* = 1/z$

$$z_0^* A + z_0 B = z^* C + z D$$
$$ik_0(z_0^* A - z_0 B) = ik(z^* C - z D) \quad (5.111)$$

$$z C + z^* D = z_0 E$$
$$ik(z C - z^* D) = ik_0 \blacksquare z_0 E \quad (5.112)$$

Estamos interessados em 1º lugar na transmissividade $\mathcal{T}$

Corrente transmitida: $j_{transm} = \frac{\hbar k_0}{m}|E|^2$

" incidente: $j_{inc} = \frac{\hbar k_0}{m}|A|^2$ (5.113)

$$\therefore \quad \mathcal{T} = \%\ transm. = \frac{j_{transm}}{j_{inc}} = \left|\frac{E}{A}\right|^2 \qquad (5.114)$$

$$\frac{1}{z_0}(A + z_0^2 B) = \frac{1}{z}C + zD$$

$$A + z_0^2 B = \frac{z_0}{z}C + z z_0 D$$

$$A - z_0^2 B = n\frac{z_0}{z}C - n z_0 z D$$

$$z C + z^* D = z_0 E$$

$$z C - z^* D = \frac{z_0}{n} E$$

$$2zC = z_0\left(1+\frac{1}{n}\right)E \Longrightarrow \quad C = \frac{1}{2}\left(\frac{z_0}{z}\right)\left(1+\frac{1}{n}\right)E$$

$$2z^* D = z_0\left(1-\frac{1}{n}\right)E \Rightarrow \quad D = \frac{1}{2}(z_0 z)\left(1-\frac{1}{n}\right)E \qquad (5.115)$$

Substituindo nas (5.111),

$$z_0^* A + z_0 B = \frac{1}{2}\frac{z_0}{z^2}\left(1+\frac{1}{n}\right)E + \frac{1}{2}z_0 z^2\left(1-\frac{1}{n}\right)E$$

$$z_0^* A - z_0 B = n\cdot\frac{1}{2}\frac{z_0}{z^2}\left(1+\frac{1}{n}\right)E - n\cdot\frac{1}{2}z_0 z^2\left(1-\frac{1}{n}\right)E$$

$$2z_0^* A = \frac{E}{2}\left\{\frac{z_0}{z^2}(n+1)\left(1+\frac{1}{n}\right) - z_0 z^2(n-1)\left(1-\frac{1}{n}\right)\right\}$$

$$= \frac{E z_0}{2n}\left[\frac{(n+1)^2}{z^2} - (n-1)^2 z^2\right] = \frac{E z_0}{2n}\frac{(n+1)^2}{z^2}\left[1 - \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 z^4\right]$$

$$\frac{E}{A} = 4\left(\frac{z_0^* z}{z_0}\right)^2 \frac{n}{(n+1)^2}\left[1 - \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 z^4\right]^{-1} \qquad (5.116)$$

$$\left(\frac{z_0^* z}{z_0}\right)^2 = \frac{e^{-ik_0 a + ika}}{} = e^{-i(k_0 - k)a} \qquad z^4 = e^{2ika}$$

$$\frac{E}{A} = 4 z_0^{*2}\frac{n}{(n+1)^2}\Big/\left[\frac{1}{z^2} - \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 z^2\right]$$

P/o degrau de potencial, vimos q (cf. (5.26), (5.28))

$$\boxed{R = \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 \qquad T = \frac{4n}{(n+1)^2}} \qquad (5.117)$$

$$\boxed{\frac{E}{A} = \frac{T e^{i(n-1)k_0 a}}{(1 - R e^{2ika})}}$$

Logo

$$\boxed{\mathcal{T} = \left|\frac{E}{A}\right|^2 = \frac{T^2}{|1 - R e^{2ika}|^2}} \qquad (5.118)$$

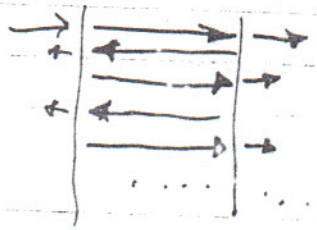
q é o resultado clássico p/ o interferômetro de Fabry-Perot (lâmina de faces ∥s) na incidência ⊥. 13ª aula 30.01

Probl. 26. Calcule a refletividade $\mathcal{R}$ e mostre que

$$\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1$$

$$\boxed{\begin{aligned} &\zeta = R e^{2ika} = (\sqrt{R}\, e^{ika})^2, \quad |\zeta| < 1 \\ &\therefore \quad \frac{1}{1-\zeta} = 1 + \zeta + \zeta^2 + \dots \qquad \text{(série geométrica)} \end{aligned}} \qquad (5.119)$$

Interpretação física em termos de reflexões múltiplas em cada degrau ↓ (por reciprocidade, reflete = te bem dos 2 lados)



Em cada reflexão, amplitude $\times \sqrt{R}$

$\therefore$ p/ 2 refls., $(\sqrt{R})^2 = R$.

Cada percurso a dá 1 fator de fase e^{ika}, $\therefore$ 2 percursos (ida + volta) $\to e^{2ika}$.

$$\boxed{\begin{aligned} |1 - R e^{2ika}|^2 &= (1 - R e^{-2ika})(1 - R e^{2ika}) = 1 + |R|^2 \\ &- R(e^{2ika} + e^{-2ika}) = 1 - 2R\cos(2ka) + |R|^2 \end{aligned}} \qquad (5.120)$$

$$\boxed{\begin{aligned} &\text{Mínimo do denom.} \longrightarrow 2ka = 2n\pi \quad \Big\{ \quad ka = n\pi \quad (n = 1, 2, \dots) \\ &\text{Máx. " "} \longrightarrow 2ka = (2n-1)\pi \quad \Big\{ \quad ka = (n - \tfrac{1}{2})\pi \quad (n = 1, 2, \dots) \end{aligned}} \qquad (5.121)$$

$$ka = n\pi \Longrightarrow \mathcal{T} = \mathcal{T}_{max} = \frac{T^2}{(1-R)^2} = 1$$

$$ka = \left(n-\tfrac{1}{2}\right)\pi \Longrightarrow \mathcal{T} = \mathcal{T}_{min} = \frac{T^2}{(1+R)^2} = \left(\frac{1-R}{1+R}\right)^2 \quad (5.122)$$

$\mathcal{T} = 1 \equiv$ <u>ressonância de transmissão</u> → devida ao reforço das reflexões múltiplas por <u>interferência construtiva</u> (defasagem = $2n\pi$)

$\mathcal{T}_{min}$ → interf. <u>destrutiva</u> [defasagem = $(2n-1)\pi$].

Se $R \approx 1$, o contraste entre máxs. e míns. é gde. Tb., vejamos a <u>largura</u> de 1 pico de ressonância:

$$ka = n\pi \pm \frac{\varepsilon}{2} \rightarrow \cos(2ka) = \cos\left(2n\pi \pm \varepsilon\right) \approx \cos\varepsilon \approx 1 - \frac{\varepsilon^2}{2}$$

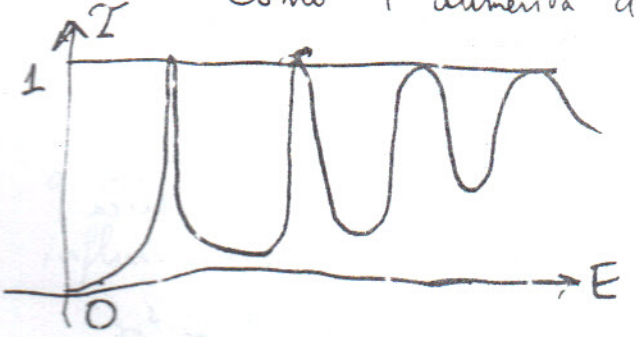
$$\therefore \quad 1 - 2R\cos(2ka) + R^2 = 1 - 2R + R^2 + 2R\cdot\frac{\varepsilon^2}{2} = T^2 + R\varepsilon^2 \quad (5.123)$$

$\mathcal{T}$ cai a $\frac{1}{2}$ p/ $R\varepsilon^2 = T^2 \left\{ \varepsilon = \pm \frac{T}{\sqrt{R}} \right.$

$\Rightarrow$ semilargura = $\varepsilon = \frac{1-R}{\sqrt{R}}$ (5.124) $\sim T$ p/ $R \approx 1$

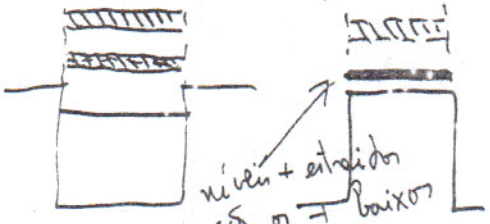
<u>Interpret. do resultado</u>: Em cada reflexão, perde-se 1 fração T da prob. de permanência na região interna $\therefore$ o nº de reflexões médio antes de sair é $\sim \frac{1}{T}$. Em cada reflexão, a defasagem é ε $\therefore$ a defasagem total é $\sim \frac{\varepsilon}{T}$, q precisa ser $\sim \pi$ p/ interf. destrutiva, o q dá' $\varepsilon \sim T$.

Como T aumenta c/ E (cf. (5.30)), a largura vai aumentando e o "contraste" das franjas vai diminuindo; p/ $E \to \infty$, $n \to 1$ e $\mathcal{T} \to 1$ como deveria ser ($R \to 0$, $T \to 1$).



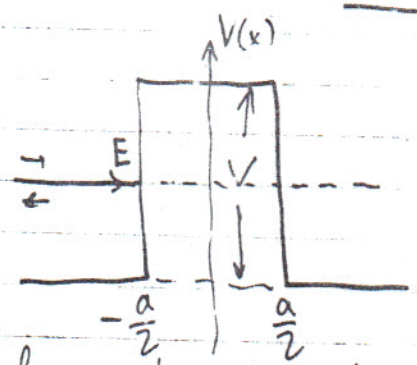
<u>Pq se chamam de "ressonâncias":</u>

As energias p/ as quais $k_n a = n\pi$ são aquelas p/ as quais teríamos níveis discretos no limite de reflexão total ($R \to 1$) ; $1 - R = T$ funciona como perturbação, acoplando a "região interna" à externa, e é responsável pela "largura" em energia ΔE dos "níveis" ressonantes no contínuo. Analogia c/ ressonância num tubo de órgão (frequ. das oscils. "forçadas" ≈ frequ. das oscils. livres).



Efeito Ramsauer : Espalhto. de elétrons de baixa energia ($E \sim 0{,}1$ a V) por átomos de gases nobres (Ne, Ar): são observadas ressonâncias de transmissão em q os átomos se comportam ≈ de como se fossem transparentes aos elétrons (secção de choque $\ll$ valores típicos p/ outras energias : é 1 efeito análogo às resson. de transm. (mas o tratto. deve ser por teoria 3-D de espalhto., e o pot n é 1 poço quadrado).

5.6 Tunelamento



É o caso da barreira, mas agora c/

$$0 < E < V \qquad (5.125)$$

Como no caso do degrau de pot., a sol. anterior continua valendo, mas agora c/

$$k = k_2 = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar = i|k_2| = i\sqrt{2m(V-E)}/\hbar \equiv iK \qquad (5.126)$$

de modo que

$$\varphi_2(x) = Ce^{-Kx} + De^{Kx}, \qquad (5.127)$$

onde ambos os coefs. são $\neq 0$ pq a sol. só se aplica à região limitada $|x| < a/2$, onde a expon. crescente não pode ser excluída.

$\bar{n}$ confundido a massa

$$n = \frac{k}{k_0} \longrightarrow \frac{iK}{k_0} = im \quad (5.129)$$

(melhor usar η em vez de m)

$$\frac{E}{A} = 4\, e^{-i(k_0 - k)a}\, \frac{n}{(n+1)^2}\left[1 - \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2 e^{2ika}\right]^{-1}$$

$$\longrightarrow 4\, e^{-ik_0 a}\cdot e^{-Ka}\cdot \frac{im}{(im+1)^2}\left[1 - \left(\frac{im-1}{im+1}\right)^2 e^{-2Ka}\right]^{-1}$$

$$|im \pm 1|^2 = m^2 + 1$$

$$\therefore \boxed{\mathcal{T} = \left|\frac{E}{A}\right|^2 = \frac{16m^2}{(m^2+1)^2} e^{-2Ka}\left|1 - \left(\frac{im-1}{im+1}\right)^2 e^{-2Ka}\right|^{-2}} \quad (5.130)$$

o q podemos escrever

$$\mathcal{T} = \frac{16m^2}{(m^2+1)^2}\cdot \frac{1}{\left|\dfrac{(im+1)^2 e^{Ka} - (im-1)^2 e^{-Ka}}{(im+1)^2}\right|^2}$$

$$= \frac{16m^2}{\left|(1-m^2)\underbrace{(e^{Ka} - e^{-Ka})}_{2\,sh(Ka)} + 2im\underbrace{(e^{Ka} + e^{-Ka})}_{2ch(Ka)}\right|^2} =$$

$$= \frac{4m^2}{(1-m^2)^2 sh^2(Ka) + 4m^2 ch^2(Ka)} \overset{ch^2 - sh^2 = 1}{=} \frac{4m^2}{\underbrace{\left[(1-m^2)^2 + 4m^2\right]}_{(1+m^2)^2} sh^2(Ka) + 4m^2}$$

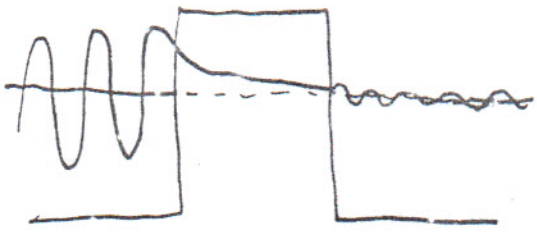
$$\boxed{\mathcal{T} = \frac{4m^2}{4m^2 + (1+m^2)^2 sh^2(Ka)}} \quad (5.131)$$

q é simétrico em $K \to -K$, mostrando q o sinal da $\sqrt{\ }$ $\bar{n}$ influi na (5.129) (5.132)

$$m^2 = \frac{V-E}{E} \quad ; \quad 1 + m^2 = \frac{V}{E} \quad \left\{ \boxed{\mathcal{T} = \frac{4E(V-E)}{4E(V-E) + V^2 \sinh^2\left[\frac{\sqrt{2m(V-E)}\,a}{\hbar}\right]}} \right.$$

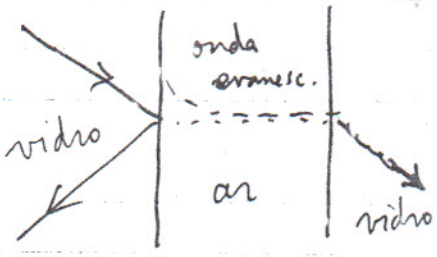
Em particular, se $\underline{Ka \gg 1}$, a (5.130) dá

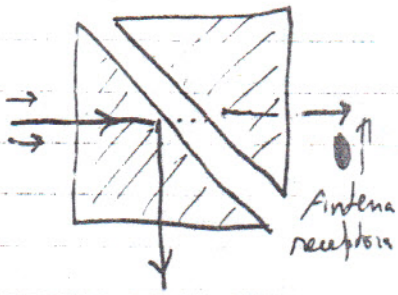
$$T \approx \frac{16m^2}{(m^2+1)^2} e^{-2Ka}$$
$$= \frac{16E(V-E)}{V^2} e^{-2\sqrt{2m(V-E)}\,a/\hbar} \qquad (5.133)$$



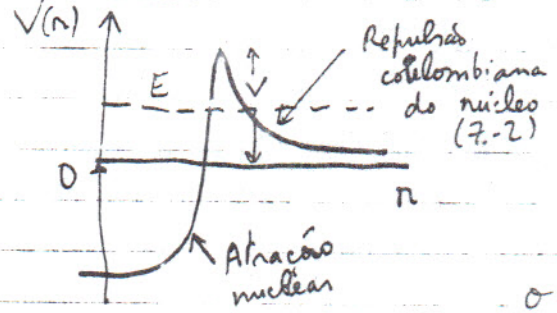
Classicamente, 1 partíc. cl $E<V$ seria totalmente refletida, não podendo atravessar a região proibida (2).

Quanticamente, $\exists$ 1 probab. $\neq 0$ de q a partíc. penetre através da barreira de pot. pelo efeito de tunelamento. Este é 1 efeito típico ondulatório, análogo à "reflexão total frustrada" na ótica: se a lâmina de ar é suficientemente delgada, a luz pode passar do outro lado (cl intens. mto fraca). Cl luz visível, mto difícil de observar (exceto na auréola!), mas fácil cl ondas de rádio (exper. de J. Bose cl 2 prismas de asfalto e 1 camada de ar de algum cm de espessura).





Exs. de tunelamento na MQ:



Desintegração α (Gamow)

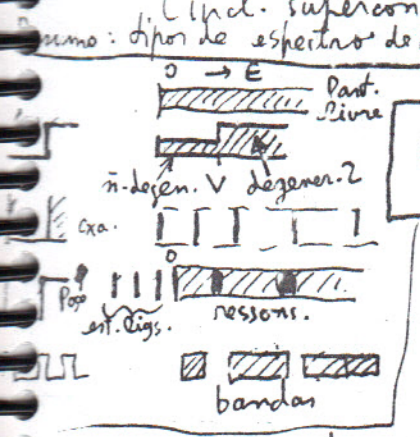
$(Z, A) \longrightarrow (Z-2, A-4) + \alpha$

A probab. de desintegração depende de forma extremamente sensitiva de $V-E$ (cf. (5.133)), o q explica pq. a meia-vida pode

variar de $\lesssim 10^{-7}$ s a $\gtrsim 10^{10}$ anos. Modelo pressupõe $\exists$cia da α no núcleo (ou probab. de formação).

Emissão de elétrons "a frio" de 1 metal por efeito de 1 cpo. elétrico; tunelam.to através da junção entre 2 materiais $\neq$s (incl. supercond.: efeito Josephson)....

12ª aula (5/10/91) 13ª aula - 27/4 11ª aula 12-09-91



6 - EQ. DE SCHRÖDINGER 3-D

6.1. Formulação 3-D

Seria possível imitar o q foi feito no caso 1-D, começando c/ 1 representação discreta e passando ao limite do contínuo: dividiríamos o espaço em cubos de aresta δ, c/ o cubo (i,j,k) correspondendo a

$$\boxed{i\delta \leq x \leq (i+1)\delta, \quad j\delta \leq y \leq (j+1)\delta, \quad k\delta \leq z \leq (k+1)\delta}$$

$$i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad j = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad (6.1)$$

e o vetor de estado seria da forma

$$\boxed{u \leftarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ C_{ijk} \\ \vdots \end{pmatrix}} \qquad (6.2)$$

onde os índices (i,j,k) poderiam ser enumerados em sequência (p/ ex. de $|i|+|j|+|k|$ crescente: $(0,0,0)$; $[(-1,0,0); (0,-1,0); (0,0,-1); (1,0,0); (0,1,0); (0,0,1)]$ etc.) e

$$\boxed{\frac{|C_{ijk}(\delta)|^2}{\delta^3} \xrightarrow[\delta \to 0]{} \text{lim. finito} = p(x,y,z) = \text{dens. de probab. de encontrar a partic. em } (x,y,z)} \qquad (6.3)$$

$i \quad j \quad k$

o q levaria à função de onda

$$\boxed{\psi(x,y,z) = \lim_{\delta \to 0} \left[\frac{C_{ijk}(\delta)}{\delta^{3/2}} \right]}, \qquad (6.4)$$

mas, em lugar de repetir todo o caminho, vamos logo formular as generalizações 3-D, que são óbvias.

$$\boxed{\vec{r} \equiv (x, y, z)} \quad (6.5)$$

Função de onda 3-D : $\psi(\vec{r}, t) \longrightarrow$ Regra I - Vetor de estado

Interpret. física : $\rightarrow$ amplit. de probab.

$$\boxed{\begin{array}{l} \rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \text{dens. de probab.} \\ \therefore |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3x = \text{probab. de encontrar a partic.} \\ \quad \text{no volume } [(x, x+dx), (y, y+dy), (z, z+dz)] \\ \quad (\text{ou no elem}^{\text{to}} \text{ de vol. } d^3x \text{ c/ centro em } \vec{r}) \end{array}} \quad (6.6)$$

$\psi = O(R^{3/2})$

Normalização

$$\boxed{\int |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x = 1} \quad (6.7)$$

extendida a todo o espaço 3-D.

$\therefore$ [$\psi \in \mathbb{C}$, e é quadratica^{te} $\int$vel 3-D

$|\psi|^2$ tem de cair p/ $R \to \infty$ + rapida^{te} que $\frac{1}{R^3}$ ($R^2|\psi|^2 \to 0$)

14ª aula 02-05

Operador momento

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\underset{\sim}{p}} &= \hat{p}_x \vec{i} + \hat{p}_y \vec{j} + \hat{p}_z \vec{k} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \right) \\ &= -i\hbar \underset{\sim}{\nabla} \end{aligned}} \quad (6.8)$$

Produto escalar

$$\boxed{(\varphi, \psi) = \int \varphi^* \psi \, d^3x} \quad (6.8)$$

Regra II - Se φ está assoc. a 1 obs. simples (estado $\vec{n}$ - degenerado) probab. de encontrar o sist. no estado φ qdo. preparado no est. ψ é $|\varphi, \psi|^2$

Valor esperado: $\langle \hat{A} \rangle_\psi = \int \psi^* \hat{A} \psi \, d^3x$

$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\varphi, \psi)$

Observável = operador hermiteano

Hermiticidade

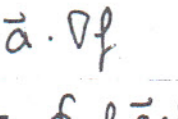
$$\boxed{(\varphi, \hat{\underset{\sim}{p}}\psi) - (\hat{\underset{\sim}{p}}\varphi, \psi)} = \int \varphi^* (-i\hbar \nabla \psi) \, d^3x$$

$$- \int \underbrace{(-i\hbar \nabla \varphi)^*}_{+i\hbar \nabla \varphi^*} \psi \, d^3x = -i\hbar \int (\varphi^* \nabla \psi + \psi \nabla \varphi^*) \, d^3x$$

$$\boxed{= -i\hbar \int \nabla (\varphi^* \psi) \, d^3x} \quad (6.9)$$

f = função escalar, $\vec{a}$ = vetor constante arbitrário $\Rightarrow$

$\Rightarrow \operatorname{div}(\vec{a} f) = \vec{a} \cdot \nabla f$



$\therefore \int_V \operatorname{div}(\vec{a} f)\, d^3x = \oint_S f \vec{a} \cdot \hat{n}\, dS = \vec{a} \cdot \oint_S f \hat{n}\, dS = \vec{a} \cdot \int_V \nabla f\, dS$

e q. vale $\forall \vec{a}$, dando a ident. vetorial

$$\int_V \nabla f\, d^3x = \oint_S f\, \hat{n}\, dS \qquad (6.10)$$

$dS = O(R^2)$; $\therefore$ basta q $\varphi^* \psi = o(R^{-3})$

cf. (6.7)

Em partic., se f cai suf^{te} depressa p/ $|\vec{r}| \to \infty$, a $\oint_S$ irá $\to 0$. Logo, na (6.9)

$$-i\hbar \int \nabla(\varphi^* \psi)\, d^3x = 0 \qquad (6.11)$$

(cf. (4.53))

p/ funções de onda φ e ψ quadraticamente $\int$veis, e a (6.9) dá

$$(\varphi, \hat{p}\psi) = (\hat{p}\varphi, \psi) \Rightarrow \hat{p} = \hat{p}^+ \qquad (6.12)$$

Hamiltoniana: $\hat{p}^2 = \hat{p} \cdot \hat{p}$ (prod. escalar dos vetores!)

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m}}_{\hat{H}_0} + V(\vec{r}) \qquad (6.13)$$

potencial $V(x,y,z)$; $\vec{F} = -\nabla V$ (6.14)

= força clássica

partíc. livre $\leftrightarrow \hat{H}_0$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(\vec{r}) \qquad (6.15)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \; ; \quad \Delta = \nabla^2$$

Eq. de Schröd dependente do tempo: | Regra III (Evolução temporal)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\vec{r})\psi \qquad (6.16)$$

Em partíc, se $\psi(\vec{r}, t) = \psi(x,t)$ só dep. de x e $V = V(x)$, recaímos no caso 1-D.

Regras de comutação canônicas

Comutadores

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \quad (6.17)$$

$$[\hat{x}, \hat{y}] = \ldots = 0$$
$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = \ldots = 0 \quad (6.18)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x^2] = \hat{p}_x [\hat{x}, \hat{p}_x] + [\hat{x}, \hat{p}_x]\hat{p}_x = 2i\hbar \hat{p}_x \quad (6.19)$$

idem p/ $\hat{p}_y$ e $\hat{p}_z$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}\right] = 0.$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$
$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

Teor. de Ehrenfest

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\underset{\sim}{p}} \rangle_{\psi_t} = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{\underset{\sim}{p}}, \hat{H}] \rangle_{\psi_t} \quad (6.20)$$

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = -\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\left[\hat{p}_x, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right]}_{=0} + \left[\hat{p}_x, V(x,y,z)\right]$$

$$[\hat{p}_x, V]\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\underbrace{\left[V(x,y,z)\psi(x,y,z)\right]}_{\frac{\partial V}{\partial x}\psi + V\frac{\partial \psi}{\partial x}} + V(x,y,z)\left(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)$$

$$\therefore \quad [\hat{p}_x, V] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \quad (6.21)$$

$$\therefore \quad [\hat{\underset{\sim}{p}}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] = 0$$
$$[\hat{\underset{\sim}{p}}, V] = -i\hbar \nabla V \quad (6.22)$$

$$\hat{\underset{\sim}{p}}\psi(\vec{r},t) = \underset{\sim}{p}\psi(\vec{r},t)$$

$$\therefore \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{\underset{\sim}{p}} \rangle_\psi = -\langle \nabla V \rangle_\psi \quad (6.23)$$

Teor. de Ehrenfest

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\underset{\sim}{r}} \rangle = \underset{\sim}{i}\frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle + \underset{\sim}{j}\frac{d}{dt}\langle \hat{y} \rangle + \underset{\sim}{k}\frac{d}{dt}\langle \hat{z} \rangle$$

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{2m}[\hat{x}, \hat{p}^2] = \frac{1}{2m}[\hat{x}, \hat{p}_x^2] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$$

$$\therefore \quad [\hat{\underset{\sim}{r}}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{\underset{\sim}{p}} \quad (6.24)$$

$$\left\{ \frac{d}{dt}\langle \hat{\underset{\sim}{r}} \rangle_\psi = \frac{1}{m}\langle \hat{\underset{\sim}{p}} \rangle_\psi \right. \quad (6.25)$$

Densidade de corrente de probabilidade

Consew. local da probab. deve ser da forma

$$\boxed{\operatorname{div}\vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0} \quad (6.26)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial t}}_{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi} = \frac{1}{i\hbar}\left[\psi^*\hat{H}\psi - (\hat{H}\psi)^*\psi\right]$$

$\uparrow$ $\psi^* V\psi - \psi^* V\psi = 0$

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left[\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*\right]} \quad (6.27)$$

$$\boxed{\operatorname{div}(\psi^*\nabla\psi) = \psi^*\Delta\psi + \nabla\psi^*\cdot\nabla\psi} \quad (6.28)$$

$\psi \leftrightarrow \psi^*$, subtração $\Longrightarrow$

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi}\operatorname{div}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)} \quad (6.29)$$

$\therefore$

$$\boxed{\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)} \quad (6.30)$$

$$\boxed{-\frac{d}{dt}\int_V \rho\, d^3x = +\int_V \operatorname{div}\vec{j}\, d^3x = +\oint_S \vec{j}\cdot\hat{n}\, dS} \quad (6.31)$$

$\uparrow$ fluxo de probab. $\not\parallel$ fora de V

p/ $V \longrightarrow$ espaço inteiro, isto dá ($\psi \to 0$ $\not\parallel$ $S \to \infty$)

$$\boxed{\frac{d}{dt}\int |\psi|^2 d^3x = 0} \quad (6.32)$$

Consew. global da probab. $\psi = O(R^{-3/2})$

6.2. Autoestados de $\hat{\underset{\sim}{r}}$ e $\hat{\underset{\sim}{H}}_0$

$$\boxed{\begin{aligned}&\hat{\underset{\sim}{r}}\,\psi_{\underset{\sim}{r}_0}(\underset{\sim}{r}) = \underset{\sim}{r}_0\,\psi_{\underset{\sim}{r}_0}(\underset{\sim}{r}) \\ &\Longrightarrow \psi_{r_0}(\underset{\sim}{r}) = \delta(\underset{\sim}{r} - \underset{\sim}{r}_0)\end{aligned}} \quad (6.33)$$

$\delta = \delta^{(3)}$

$$\hat{\underset{\sim}{p}}\,\psi_{\underset{\sim}{p}}(\underset{\sim}{r}) = \underset{\sim}{p}\,\psi_{\underset{\sim}{p}}(\underset{\sim}{r}) \qquad (6.34)$$

1-D:

$$\psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i p_x x/\hbar} \longrightarrow (\psi_{p'_x}, \psi_{p_x}) = \delta(p'_x - p_x) \qquad (6.35)$$

↑ Normaliz. no espectro contínuo

3-D:

$$\psi_{\underset{\sim}{p}}(\underset{\sim}{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\,\underset{\sim}{p}\cdot\underset{\sim}{r}/\hbar} = \psi_{p_x}\psi_{p_y}\psi_{p_z} \qquad (6.36)$$

$e^{i\,\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{r}}$ ← onda plana 3-D c/ vetor de onda $\underset{\sim}{k}$.

c/

$$\underset{\sim}{p} = \hbar\,\underset{\sim}{k} \qquad (6.37)$$

Verif.: escrevendo $\hat{\underset{\sim}{p}} = \hat{p}_x\,\underset{\sim}{i} + \hat{p}_y\,\underset{\sim}{j} + \hat{p}_z\,\underset{\sim}{k}$, ou usando

$$\underset{\sim}{\nabla}\left(e^{i\,\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{r}}\right) = i\,\underset{\sim}{k}\,e^{i\,\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{r}} \qquad (6.38)$$

$$\therefore\ \psi^*_{\underset{\sim}{k}}\,\underset{\sim}{\nabla}\psi_{\underset{\sim}{k}} = i\,\underset{\sim}{k}\,|\psi_{\underset{\sim}{k}}|^2 = \frac{i\,\underset{\sim}{p}}{\hbar}|\psi_{\underset{\sim}{k}}|^2$$

$$\Rightarrow \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\frac{i}{\hbar}\underset{\sim}{p} + \frac{i}{\hbar}\underset{\sim}{p}\right)|\psi_{\underset{\sim}{k}}|^2$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{j} = \rho\,\vec{v},\ \ \vec{v} = \vec{p}/m,\ \ \rho = |\psi_{\underset{\sim}{k}}|^2}$$

Normalização:

$$(\psi_{\underset{\sim}{k}}, \psi_{\underset{\sim}{k}'}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p_x - p'_x)x/\hbar}dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p_y - p'_y)y/\hbar}dy \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p_z - p'_z)z/\hbar}dz \qquad (6.38a)$$

$\therefore$

$$(\psi_{\underset{\sim}{k}}, \psi_{\underset{\sim}{k}'}) = \delta(\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}') \qquad (6.39)$$

↙ ortonormalidade no contínuo

Interpret. em termos de feixe de partículas

Completeza

$$\int \psi_{\underset{\sim}{k}}(\underset{\sim}{r})\,\psi^*_{\underset{\sim}{k}}(\underset{\sim}{r}')\,d^3p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{i\,\underset{\sim}{p}\cdot(\underset{\sim}{r} - \underset{\sim}{r}')/\hbar}d^3p = \delta(\underline{r} - \underline{r}')$$

Expansão em autofunções

$$\varphi(\underset{\sim}{r}) = \int c(\underset{\sim}{p})\,\psi_{\underset{\sim}{p}}(\underset{\sim}{r})\,d^3p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} d^3p\; c(\underset{\sim}{p})\,e^{i\,\underset{\sim}{p}\cdot\underset{\sim}{r}/\hbar}$$

$\underset{\sim}{p} = \hbar\,\underset{\sim}{K}$

$$c(\underset{\sim}{p}) = (\psi_{\underset{\sim}{p}}, \varphi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3x\, e^{-i\,\underset{\sim}{p}\cdot\underset{\sim}{r}/\hbar}\,\varphi(\underset{\sim}{x}) \qquad (6.40)$$

$$= \frac{1}{\hbar^{3/2}}\,\tilde{\varphi}(\underset{\sim}{k}),\ \ \underset{\sim}{k} = \underset{\sim}{p}/\hbar \qquad (6.41)$$

↑ Transf. de Fourier

$\equiv \tilde{\varphi}(\underset{\sim}{p})$

$E = \frac{p^2}{2m}$

$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$

$\hbar^2\,\underset{\sim}{K}^2$

$K_x^2 + K_y^2 + K_z^2 = \underset{\sim}{K}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$= |c(p)|^2$

Rel. de Bessel-Parseval (verifique!)

$$\int |\psi(\underset{\sim}{r})|^2 d^3x = \int |\tilde{\psi}(\underset{\sim}{k})|^2 d^3k = \int |\tilde{\psi}(\underset{\sim}{p})|^2 d^3p = 1 \quad (6.42)$$

$|\tilde{\psi}(\underset{\sim}{p})|^2 d^3p$ = probab. de q a partíc. seja encontr. q o mom. num endorno d^3p de $\underset{\sim}{p}$ (6.43)

$\tilde{\psi}(\underset{\sim}{p})$ = função de onda no espaço dos momentos

Autofunções de $\hat{H}_0$

$$\psi_E(\underset{\sim}{r}, t) = \varphi_E(\underset{\sim}{r})\, e^{-iEt/\hbar} \quad (6.44)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_E}{\partial t} = E\psi_E = \hat{H}_0 \psi_E = \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi_E \qquad E \geq 0$$

$$\rightarrow \quad \hat{p}^2/2m\, \varphi_E(\underset{\sim}{r}) = E\, \varphi_E(\underset{\sim}{r}) \quad (6.45)$$

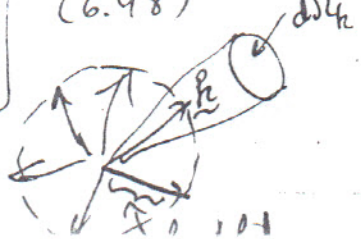
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi_E = E\varphi_E \quad \left\{ \begin{array}{l} (\Delta + k^2)\varphi_E(\underset{\sim}{r}) = 0 \\ k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} \end{array} \right. \quad (6.46)$$

Eq. de ondas livres 3-D

A sol. geral é 1 superposição de ondas planas, todas d o mmo. nº de onda k mas propagando-se em direções $\neq$s, $k = |\underset{\sim}{k}|$

$$\underset{\sim}{k} \equiv (k, \Omega_k) \qquad \Omega_k = (\theta_k, \varphi_k) \qquad d\Omega_k = \sin\theta_k\, d\theta_k\, d\varphi_k \quad (6.47)$$

$$\varphi_k(\underset{\sim}{r}) = \int c_k(\Omega_k)\, e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{r}}\, d\Omega_k \quad (6.48)$$



Todas são autofunções de $\hat{p}$, d

$$\boxed{E = \frac{\underset{\sim}{p}^2}{2m} = c^{te}} \quad (6.49)$$

de modo q os autovalores E são ∞^{te} degenerados, c/ 1 ∞ dade contínua de autoestados ψ_E correspondendo a todas as direções de propag. possíveis 3-D (em 1-D, só há 2, de modo q E era duplo^{te} degenerado).

Sol. geral da eq. de Schröd. livre

$$\boxed{\psi(\underset{\sim}{r},t) = \int_0^\infty c(E)\, \varphi_E(\underset{\sim}{r})\, e^{-iEt/\hbar}\, dE} \quad (6.50)$$

onde

$$\boxed{dE = d\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{p\,dp}{m} = \frac{|\underset{\sim}{p}|\,dp}{m}} \quad (6.51)$$

$$\boxed{\int_0^\infty |\underset{\sim}{p}|^2 dp \int d\Omega_p = \int d^3p} \quad (6.52)$$

↑ espaço todo

Logo, tb. podemos escrever (cf. (4.131))

$$\boxed{\psi(\underset{\sim}{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \tilde{\psi}_0(\underset{\sim}{p})\, e^{i\left(\underset{\sim}{p}\cdot\underset{\sim}{r} - \frac{\underset{\sim}{p}^2}{2m}t\right)/\hbar}\, d^3p} \quad (6.53)$$

onde $\tilde{\psi}_0(\underset{\sim}{p})$ é a função de onda inicial, representada no espaço dos momentos.

$\tilde{\psi}_0(\underset{\sim}{p}) = (\psi_{\underset{\sim}{p}}(\underset{\sim}{r}), \psi(\underset{\sim}{r},0))$

A (6.53), sol. geral da eq. de Schröd. livre 3-D, é 1 pacote de ondas 3-D.

A Relação de Incerteza

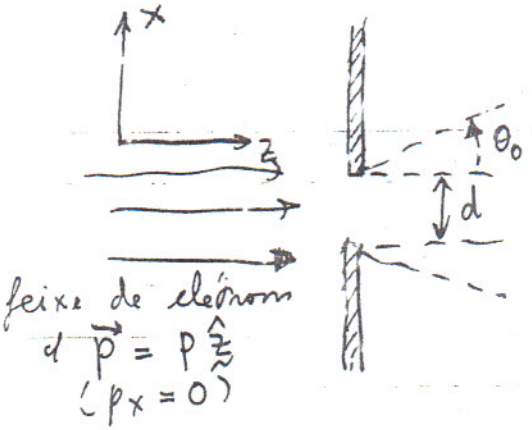
Das rels. de comutação canônicas segue que

$$\boxed{\Delta x\, \Delta p_x \gtrsim \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y\, \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z\, \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (6.54)$$

ao passo q todos os demais pares de variáveis (x e p_y, p_z, H etc) podem ser

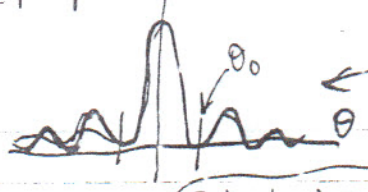
medidos simultaneam.te c/ precisão.

Medidas de posição: a) Podemos tentar localizar a posição c/ 1 diafragma num anteparo impenetrável; se é 1 fenda ∞ de largura d,



$$\boxed{\Delta x = d} \quad (6.55)$$

após os elétrons terem atravessado. Antes era $\Delta p_x = 0$, mas ñ há contrad. c/ a rel. de incert., pq $\Delta p_x \neq 0$ depois do atravessam.to, devido à difração (propr. ondulatórias). P/ 1 onda plana monocr. de n.º de onda k, a fig. de difração tem o aspecto, c/ a > parte da intens. no pico central, p/ o qual é



$$\boxed{\operatorname{sen}\theta_0 \approx \frac{\lambda}{d} = \frac{2\pi}{kd}} \quad (6.56)$$

Supondo $\lambda \ll d$ (OK na prática)

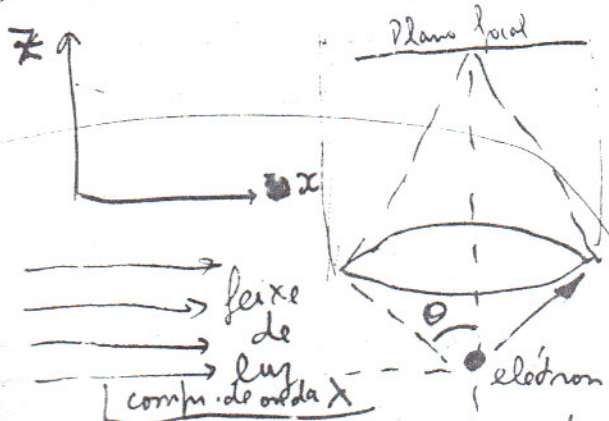
$k = p/\hbar$

Comparar c/ $d \sim \frac{\lambda}{\operatorname{sen}\theta}$ (difração por 1 abertura de ∡ θ)

Mas isto dá

$$\boxed{\Delta p_x \sim p \operatorname{sen}\theta \sim p\frac{2\pi\hbar}{pd} \sim \frac{2\pi\hbar}{d} \sim \frac{2\pi\hbar}{\Delta x}} \quad (6.57)$$

b) O microscópio de Heisenberg: Poderíamos tentar "ver" o elétron num super-microscópio p/ localizá-lo.



Isto vem de $k\sin\theta$ imagem de difração

Devido à natureza ondulatória da luz, a imagem de 1 pto. é 1 mancha c/ anéis de difração, o q leva a 1 poder separador (Heisenberg não conhecia!)

$$\boxed{\Delta x \sim \frac{\lambda}{\operatorname{sen}\theta}} \quad (6.58)$$

(argumento de Bohr)

onde Δx é a < dist. entre 2 ptos. q podem ser distinguidos 1 do outro (∴ ≡ incerteza coord. x da posição do elétron) e θ é o ∡ de abertura da objetiva do microscópio (fig.)

Devido à natureza corpuscular da luz, o

espalhado de luz pelo elétron modifica seu momento (pressão de radiação: microscópica, colisão fóton-elétron). P/ minimizar ~~[illegible]~~ a transfer. de momento, podemos espalhar 1 só fóton. Mas, como não sabemos em q direção o fóton se propaga dentro do ∠ de abertura θ, há 1 incerteza na compon. x do momento do fóton de

$$\boxed{\Delta p_x \sim p \operatorname{sen}\theta = \hbar k \operatorname{sen}\theta}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \leftarrow \text{do fóton}$$

Pela conserv. do momento, cuja (6.59) é H. a incerteza Δp_x p/ o elétron (recuo). Logo,

$$\boxed{\Delta x \, \Delta p_x \sim \frac{\lambda}{\operatorname{sen}\theta} \cdot \hbar k \operatorname{sen}\theta = \hbar k \lambda = 2\pi\hbar} \quad (6.60)$$

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$

14ª aula - 7/5

Como exemplo de solução da eq. de Schröd. livre que é 1 superposição de autoestados do momento,

---

Prob. 27 (a) Mostre que

$$\psi_E(r,t) = \frac{\operatorname{sen}(kr)}{r} e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}, \quad e^{-iEt/\hbar}, \quad r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

é 1 estado estac. de partíc. livre, mas não é 1 autoestado do momento.

(b) Represente $\psi_E(r,\theta)$ como superposição de autoestados do momento $\psi_{\underline{p}}(\underline{r})$ com $|\underline{p}| = \sqrt{2mE}$ (ondas planas em todas as direções), mostrando primeiro que

$$\frac{\operatorname{sen}(kr)}{r} = \frac{k}{4\pi} \int_0^{\pi} \operatorname{sen}\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \, e^{ikr\cos\theta}$$

13ª aula 13/10/92

1ª aula - 7/5

7. A NOTAÇÃO DE DIRAC

7.1. Kets e bras

Já vimos em vários exemplos que o mesmo estado quântico pode ser representado de várias maneiras diferentes. Assim, p/ ex., no caso da polarização de fótons, tínhamos 4 representações p/ o mesmo estado de polarização conforme tomássemos como vetores de base os estados de polarização linear ortogonais ou os estados de polarizações circulares opostas.

P/ 1 partíc. 3-D, o mesmo estado num instante dado pode ser descrito equivalentemente por

$$\begin{cases} \psi(\underset{\sim}{r}) & (\text{espaço das configurações}), \\ \tilde{\psi}(\underset{\sim}{p}) & (\text{" dos momentos}), \end{cases} \tag{7.1}$$

passando-se de uma representação p/ a outra pela transformação de Fourier (direta ou inversa).

Podemos comparar a situação cl a da represent. de um vetor pelas suas componentes: conforme o sist. de coordenadas (vetores de base) escolhido, as componentes variam, mas representam sempre o mesmo vetor. As 4s escolhas na (7.1) correspondem a uma mudança de coordenadas

$$\psi(\underset{\sim}{r}) = \int \tilde{\psi}(\underset{\sim}{p})\, \underbrace{\psi_{\underset{\sim}{p}}(\underset{\sim}{r})}\, d^3p \tag{7.2}$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\underset{\sim}{p}\cdot\underset{\sim}{r}/\hbar} \quad (\Leftrightarrow \text{vetores da base})$$

A notação de Dirac representa p/ os estados quânticos o análogo do uso da notação de vetor $\underset{\sim}{v}$ em lugar do uso das componentes v_j numa dada base $\underset{\sim}{e}_j$ ($\underset{\sim}{v} = \sum_j v_j \underset{\sim}{e}_j$): tem a vantagem de lidar cl o objeto intrínseco (independente da escolha do "sist. de coords."). A analogia cl vetores já foi enfatizada no caso da polariz. de fótons e no uso da expressão "vetor de estado".

Um vetor de estado "intrínseco" é descrito na notação de Dirac por um "ket"

$|\psi\rangle$ → Kets como espaço vetorial → $\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle = \text{ket}$, $\lambda \in \mathbb{C}$

onde ψ é o "rótulo" que caracteriza o vetor (como v em $\vec{v}$)

Vimos q, p/ estados d 1 nº finito de componentes, o estado pode ser representado de pelo vetor coluna v ou pelo vetor linha v^+; analogam^te, p/ funções de onda, for ψ ou ψ^*. O conceito análogo na notação de Dirac é o do "bra"

$\langle\psi|$ → espaço vetorial dual (funcional linear)

O produto escalar u^+v é um nº complexo idem p/ (φ, ψ). Analogam^te, o produto escalar de um bra por um ket é um nº complexo

$$\boxed{\langle\varphi|\psi\rangle \longleftrightarrow (\varphi, \psi)} \quad (7.3)$$

resultante de completar o "bracket" $\langle\ \rangle$, e d as propriedades (equivalentes às de

$$\boxed{\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle} \quad (7.4)$$

$$\boxed{\langle\psi|\psi\rangle = \| |\psi\rangle \|^2 \geq 0} \quad (7.5)$$

↑ Norma

P/ 1 vetor de estado normalizado,

$$\boxed{\langle\psi|\psi\rangle = 1} \quad (7.6)$$

7.2. Operadores

Como p/ funções de onda, 1 operador (linear) $\hat{A}$ associa a um ket $|\psi\rangle$ outro ket

$$\boxed{|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle} \quad (7.7)$$

de tal maneira que (linearidade), p/ 1 superposição de estados,

$$\hat{A}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1 \hat{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2 \hat{A}|\psi_2\rangle \quad (7.8)$$

(λ_1, λ_2 = nºs complexos $\forall$).

O produto escalar

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle \quad (7.9) \quad \longleftrightarrow \quad (\varphi, \hat{A}\psi)$$

chama-se <u>elemento de matriz</u> de $\hat{A}$ entre os estados $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$. Em particular,

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\hat{A}\rangle_\psi \quad (7.10)$$

é o <u>valor esperado</u> de $\hat{A}$ no estado $|\psi\rangle$. Também podemos considerar a (7.9) como o produto escalar do bra $\langle\varphi|\hat{A}$ pelo ket $|\psi\rangle$, ou seja, podemos considerar $\hat{A}$ como <u>operador linear sobre bras</u>:

$$\langle\varphi'| = \langle\varphi|\hat{A} \quad (7.11) \qquad (\lambda_1\langle\varphi_1| + \lambda_2\langle\varphi_2|)\hat{A} = \lambda_1\langle\varphi_1|\hat{A} + \lambda_2\langle\varphi_2|\hat{A}$$

Note que neste caso $\hat{A}$ tem de estar <u>à direita</u> do bra, ao passo q tem de estar <u>à esquerda</u> de um ket, da mesma forma que podemos multiplicar uma matriz A por um vetor coluna v (Av) ou um vetor linha v^+ por A: (v^+A) (cf. (2.9), (2.10)).

Produto externo

u^+v = nº complexo (produto escalar ou interno, como $u \cdot v$)

vu^+ = matriz (" externo); ex.: $e_j e_j^+$ = operador hermitiano, de projeção Π_j. Vimos, p/ matrizes, que

$$A = \sum \lambda_j \Pi_j, \quad \mathbb{1} = \sum \Pi_j \quad (7.12)$$

Analogamente,

$$|\varphi\rangle\langle\psi| \equiv \hat{A} \quad (7.13)$$

"diádico"

é 1 <u>operador linear</u> (análogo da matriz), que, aplicado

a um ket $|\chi\rangle$, dá

$$\hat{A}|\chi\rangle = |\varphi\rangle \underbrace{\langle\psi|\chi\rangle}_{=c=\text{nº complexo}} = c\,|\varphi\rangle, \quad (7.14)$$

ou seja, dá um ket na "direção" do ket $|\varphi\rangle$.

Operadores de projeção: Se $|\varphi\rangle$ é 1 ket normalizado, $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$,

$$\hat{\Pi}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi| \quad (7.15)$$

é o operador de projeção na "direção" $|\varphi\rangle$ (sobre o estado $|\varphi\rangle$). Temos

$$\hat{\Pi}_\varphi^2 = |\varphi\rangle\underbrace{\langle\varphi|\varphi\rangle}_{=1}\langle\varphi| = |\varphi\rangle\langle\varphi| = \hat{\Pi}_\varphi$$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = 0 \Rightarrow \hat{\Pi}_\varphi\hat{\Pi}_\psi = \hat{\Pi}_\psi\hat{\Pi}_\varphi = \hat{0} \quad (7.16)$$

como deveria ser.

$$\hat{\Pi}_\varphi|\psi\rangle = |\varphi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle = a|\varphi\rangle \quad (7.17)$$

= "componente de $|\psi\rangle$ na direção $|\varphi\rangle$"

onde

$$a = \langle\varphi|\psi\rangle$$

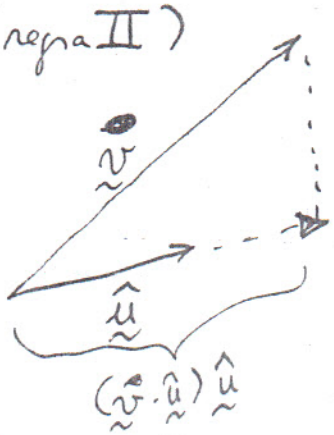
= amplitude de probab. de encontrar $|\psi\rangle$ no estado $|\varphi\rangle$

$$|a|^2 = |\langle\varphi|\psi\rangle|^2 \quad (7.18)$$

= probab. (regra II)

A (7.17) é análoga a

$$(\underset{\sim}{\hat{v}}\cdot\underset{\sim}{\hat{u}})\,\underset{\sim}{\hat{u}} = \text{componente de } \underset{\sim}{\hat{v}} \text{ na direção } \underset{\sim}{\hat{u}} \quad (7.19)$$



Note a ≠ça entre

$\langle\varphi|\psi\rangle$ = nº (prod. escalar ou interno)

$|\varphi\rangle\langle\psi|$ = operador (" " externo)

7.3. Conjugado hermiteano

Foi definido por

$$(\psi, \hat{A}\psi)^* = (\hat{A}^+\psi, \psi)^* = (\psi, \hat{A}^+\psi) \quad (7.20)$$

o q, na notação de Dirac, equivale a

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^+|\psi\rangle \quad (7.21)$$

ou seja, pl tomar o complexo conjug. de uma expressão (produto) contendo bras, kets e operadores, transformam-se os bras em kets e vice-versa, substituem-se os opers. pelos hermiteanos conjugados, e escreve-se o produto em ordem inversa.

Probl. 28. Mostre que

$$(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}$$

Ex.: Vamos calcular o conj. hermit. de

$$\hat{A} = |\varphi\rangle\langle\psi| \quad (7.22)$$

Por def.,

$$\langle x|\hat{A}|\eta\rangle^* = \langle\eta|\hat{A}^+|x\rangle$$

Mas

$$\langle x|\hat{A}|\eta\rangle^* = (\langle x|\varphi\rangle\langle\psi|\eta\rangle)^* = \langle\eta|\psi\rangle\langle\varphi|x\rangle, \quad \forall |x\rangle, |\eta\rangle.$$

Logo,

$$\hat{A}^+ = |\psi\rangle\langle\varphi| \quad (7.23)$$

o q é consistente c/ a regra acima.

Eq. de autovalores: $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ (7.24)

Notação usual pl o autovetor $\equiv |\lambda\rangle$ { $\hat{A}|\lambda\rangle = a\,\lambda|\lambda\rangle$

7.4. Representações

(a) Caso discreto

Consideremos 1º o ex. de 1 partícula numa caixa em 1-D. Vimos neste caso q os autoestados da energia formam 1 conjunto discreto $\varphi_{E_n}(x)$, cl as propriedades

(7.25) $\boxed{(\varphi_{E_{n'}}, \varphi_{E_n}) = \delta_{n',n}}$ (conj. ortonormal)

e completo, no sentido de que $\forall$ função de onda φ pode ser expandida nele:

$$\boxed{\varphi = \sum_n c_n \varphi_n} \quad (7.26)$$

onde

$$\boxed{c_n = (\varphi_n, \varphi)} \quad (7.27)$$

Explicitando,

$$\boxed{\varphi(x) = \sum_n \varphi_n(x) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x') \varphi(x')\, dx'}_{c_n}} \quad (7.28)$$

Se admitirmos q é possível inverter $\sum_n$ cl $\int dx'$,

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \varphi(x') \sum_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(x') \quad , \quad \forall \varphi$$

o. q leva a

$$\boxed{\sum_n \varphi_n(x) \varphi_n^*(x') = \delta(x-x')} \quad (7.29)$$

• Esta rel. chama-se rel. de "completeza" ou de fechamento

Passando p/ a notação de Dirac,

$$\boxed{\varphi_{E_n}(x) \longrightarrow |n\rangle \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)} \quad (7.30)$$

constituem uma base ortonormal de kets, cl

$$\boxed{\langle n' | n \rangle = \delta_{nn'}} \quad (7.31)$$

∴ o estado pode ser repres. pelo Vetor coluna de ∞s linhas:

$$\forall |\varphi\rangle \quad \begin{pmatrix} \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \\ c_{n+1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

e a (7.26) se escreve

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \qquad c_n = \langle n|\psi\rangle} \quad (7.32)$$

ou seja,

$$\boxed{|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle} \quad (7.33)$$

o q equivale a

$$\boxed{\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}} \quad (7.34)$$

Rel. de fechamento (resolução da identidade)

$$= \sum_n \hat{\Pi}_n$$

Projeta sobre o estado $|n\rangle$ (cada)

q é a representação da (7.29) na notação de Dirac (δ equivale ao operador $\hat{1}$ na represent. de x).

A (7.34) generaliza o resultado (2.30)

$$\boxed{\sum_j \Pi_j = \mathbb{1}} \quad (7.35)$$ ← matriz

obtido p/ o caso de um nº finito de estados. P/ obter a expansão de qq ket na base $|n\rangle$, basta inserir a (7.34) como 1 "sanduíche", levando à identidade (7.33). (é o q se chama "inserir um conjunto completo de estados"). É o análogo de $\underset{\sim}{v} = \sum_j \hat{\underset{\sim}{e}}_j (\hat{\underset{\sim}{e}}_j \cdot \underset{\sim}{v})$ p/ 1 vetor.

$$v_j = \sum_j \hat{\Pi}_j \cdot \underset{\sim}{v}$$

Representação de operadores

Podemos escrever, aplicando duas vezes a (7.34),

$$\boxed{\hat{A} = \sum_{m,n} |m\rangle\langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n| = \sum_{m,n} A_{mn}|m\rangle\langle n|} \quad (7.36)$$

onde

$$A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle \qquad (7.37)$$

matriz hermitiana conjugada

é o elemento de matriz de $\hat{A}$ entre os estados $|m\rangle$ e $|n\rangle$. Logo, podemos representar $\hat{A}$ pela matriz cc

$$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdots & A_{mn} & \cdots & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

$$\langle m|\hat{A}^+|n\rangle = \langle n|\hat{A}|m\rangle^*$$
$$(\hat{A}^+)_{mn} = A^*_{nm}$$

o q justifica o nome de elemento de matriz e generaliza a assoc. entre observáveis e matrizes que vimos p/ dimensão finita.

Na representação $|n\rangle$, temos, c/ $c_n = \langle n|\varphi\rangle$

$$|\varphi'\rangle = \hat{A}|\varphi\rangle = \sum_n \hat{A} c_n |n\rangle = \sum_n \hat{A}|n\rangle\langle n|\varphi\rangle$$

$$= \sum_m |m\rangle\langle m|\varphi'\rangle = \sum_m |m\rangle\langle m|\hat{A}|\varphi\rangle =$$

$$= \sum_{mn} \underbrace{\langle m|\hat{A}|n\rangle}_{A_{mn}} \underbrace{\langle n|\varphi\rangle}_{c_n} |m\rangle \qquad (7.38)$$

ou seja,

$$|\varphi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \Rightarrow |\varphi'\rangle = \hat{A}|\varphi\rangle = \sum_n c'_m |m\rangle \qquad (7.39)$$

onde

$$c'_m = \sum_n A_{mn} c_n , \qquad (7.40)$$

Analogia de $(\hat{A}\hat{B})_{mn} = \sum_j (\hat{A})_{mj}(\hat{B})_{jn}$ (prod. de matrizes)

q é exatamente o produto da matriz $\|A\|$ pelo vetor coluna (c_n) (cf. (2.9)).

$$(\hat{A}\hat{B})_{mn} = \langle m|\hat{A}\hat{B}|n\rangle = \sum_{n'} \langle m|\hat{A}|n'\rangle\langle n'|\hat{B}|n\rangle$$

~~Estatística Quântica~~

Heisenberg introduziu a MQ baseado em matrizes, enquanto Schrödinger usara funções de onda + tarde " mostrou a equivalência entre as duas formulações (cf. citação em Mandin).

(b) Espectro contínuo — $\hat{p}$

Ex.: autoestados do momento 1-D, $\psi_p(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$.

Vimos que

$$\boxed{(\psi_{p'}, \psi_p) = \delta(p-p')} \quad (7.38)$$ ortonormalidade

O análogo da rel. de fecho é 1 "Σ" sobre todos os autovalores, ou seja ($\Sigma \to \int$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\, \psi_p(x)\, \psi_p^*(x') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar}\, e^{ip(x-x')/\hbar}$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ik(x-x')} = \delta(x-x')$$

ou seja,

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dp\, \psi_p(x)\, \psi_p^*(x') = \delta(x-x')} \quad (7.39)$$ Generaliz. da (7.29)

q exprime o caráter completo das ondas planas ($\int$ de Fourier)

Notação de Dirac:

$$\boxed{\psi_p \longrightarrow |p\rangle} \quad (7.40)$$

com

$$\boxed{\langle p'|p\rangle = \delta(p-p')} \quad (7.41)$$

e

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dp\, |p\rangle\langle p| = \hat{1}} \quad (7.42)$$

Analogamente às autofunções de $\hat{x}$ — o rótulo é o autovalor

$$\boxed{\psi_{x_0}(x) = \delta(x-x_0) \longrightarrow |x_0\rangle} \quad (7.43)$$

onde tb. (cf. (4.98))

$$\boxed{\langle x_0'|x_0\rangle = \delta(x_0-x_0')} \quad (7.44) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_{x_0'}^*(x)\, \psi_{x_0}(x)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_0\, \psi_{x_0}(x)\, \psi_{x_0}^*(x') = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0\, \delta(x-x_0)\delta(x'-x_0) = \delta(x'-x')$$

ou seja

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dx_0 |x_0\rangle\langle x_0| = \hat{1}} \quad (7.45)$$

A Representação de Configuração (Schrödinger)

Pela (7.45):

$$\boxed{|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle \underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\text{análogo de } c_n}} \quad (7.46)$$

Seja

$$\boxed{\psi(x) = \langle x|\psi\rangle} \quad (7.47)$$

Esta é a função de onda de Schrödinger, q aparece simplesmente como coef. de expansão na expansão do vetor de estado nos autovetores $|x\rangle$ do operador $\hat{x}$ (vetor coluna de 1 ∞dade contínua de linhas).

Em particular,

$$\boxed{\langle x|x_0\rangle = \delta(x-x_0) = \psi_{x_0}(x)} \quad (7.48)$$

é a representação do ket $|x_0\rangle$ na repres. de configuração, o que concorda c/ a (7.43).

A Representação de Momento

Os autovetores do operador momento são definidos por

$$\boxed{\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle} \quad (7.49)$$

Na representação de configuração, como já vimos,

$$\boxed{\psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}} \quad (7.50)$$

e

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}} \quad (7.51)$$

Analoga à (7.46), temos

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, |p\rangle \underbrace{\langle p|\psi\rangle}_{\tilde{\psi}(p)} = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\,|p\rangle\, dp \qquad (7.52)$$

onde

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle \qquad (7.48)$$

é a <u>função de onda no espaço dos momentos</u> associada ao <u>mesmo</u> vetor de estado $|\psi\rangle$. A (7.46) dá, c/ a (7.50),

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \langle p|x\rangle \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \qquad (7.49)$$

o q <u>coincide</u> c/ a definição anterior. Vemos que <u>$\langle p|x\rangle$</u> representa o <u>coeficiente de transformação</u> ligando a representação $\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$ no espaço de mom. c/ a represent. $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ no esp. de configurs.:

$$\langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle \qquad (7.50)$$

q é 1 aplicação da (7.45). Analogam^te,

$$\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle \qquad (7.51)$$

equivale a

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\; e^{ipx/\hbar}\, \tilde{\psi}(p) \qquad (7.52)$$

ou seja, à transf. inversa, c/ coef. de transf. <u>$\langle x|p\rangle$</u>.

<u>Probl 29</u>. Mostre que, na representação de momento, $\hat{x}$ é <u>representado por</u>

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \qquad (7.53)$$

e calcule as autofunções de $\hat{x}$ nessa representação

(e $\hat{p}$ é o oper. de multipl. por p; analogam^te, na represent. de $\hat{x}$, $\hat{x} \equiv$ " " " x e $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$).

(c) Extensão ao caso 3-D

$$\psi_{\underset{\sim}{r}_0}(\underset{\sim}{r}) = \delta(\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{r}_0) \longleftrightarrow |\underset{\sim}{r}_0\rangle \quad (7.54)$$

Represent. de configuração

$$\psi(\underset{\sim}{r}) = \langle \underset{\sim}{r}|\psi\rangle \quad (7.55)$$

com

$$\int |\underset{\sim}{r}\rangle\langle\underset{\sim}{r}|\, d^3\underset{\sim}{r} = \hat{1} \quad , \quad \langle \underset{\sim}{r}'|\underset{\sim}{r}\rangle = \delta(\underset{\sim}{r}-\underset{\sim}{r}') \quad (7.56)$$

$$|\psi\rangle = \int \psi(\underset{\sim}{r})\,|r\rangle\, d^3r \quad (7.57)$$

Represent. de momento

$$\psi_{\underset{\sim}{p}}(\underset{\sim}{r}) = \frac{e^{i\underset{\sim}{p}\cdot\underset{\sim}{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} = \langle \underset{\sim}{r}|\underset{\sim}{p}\rangle \quad (7.58)$$

onde

$$\hat{\underset{\sim}{p}}\,|\underset{\sim}{p}\rangle = \underset{\sim}{p}\,|\underset{\sim}{p}\rangle \quad (7.59)$$

são os autovetores de $\hat{\underset{\sim}{p}}$, d

$$\langle \underset{\sim}{p}'|\underset{\sim}{p}\rangle = \delta(\underset{\sim}{p}-\underset{\sim}{p}'), \quad \int |\underset{\sim}{p}\rangle\langle\underset{\sim}{p}|\, d^3\underset{\sim}{p} = \hat{1} \quad (7.60)$$

Função de onda no espaço dos momentos:

$$\tilde{\psi}(\underset{\sim}{p}) = \langle \underset{\sim}{p}|\psi\rangle = \int d^3r\, \langle \underset{\sim}{p}|\underset{\sim}{r}\rangle\langle\underset{\sim}{r}|\psi\rangle$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3\underset{\sim}{r}\; e^{-i\underset{\sim}{p}\cdot\underset{\sim}{r}/\hbar}\, \psi(\underset{\sim}{r}) \quad (7.61)$$

corresp. à (6.41).

$$\psi(\underset{\sim}{r}) = \langle \underset{\sim}{r}|\psi\rangle = \int d^3p\, \langle \underset{\sim}{r}|\underset{\sim}{p}\rangle\langle\underset{\sim}{p}|\psi\rangle$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r\; e^{i\underset{\sim}{p}\cdot\underset{\sim}{r}/\hbar}\, \tilde{\psi}(\underset{\sim}{p}) \quad (7.62)$$

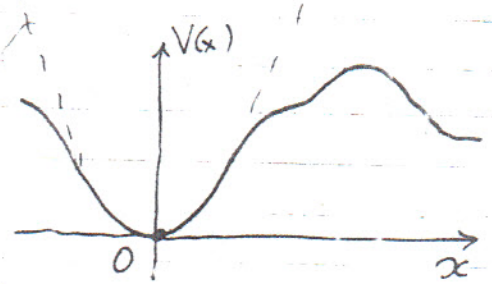
(Transf. inversa)

16ª aula - 9-5

15ª aula - 11-5

8. O OSCILADOR HARMÔNICO (1-D)

8.1. O oscilador clássico



∀ pot. V(x) q tenha 1 mínimo define nele 1 pos. de equilíbrio estável; p/ pequenos desloca^tos em torno desse mínimo, o sist. oscila em torno do equilíbrio, comportando-se como 1 oscilador harmônico.

Cl efeito, tomando a pos. do mínimo como origem, temos, p/ x suf^te pequeno (série de Taylor)

$$\boxed{V(x) = \underbrace{V(0)}_{\text{podemos tomar } = 0} + \underbrace{V'(0)}_{=0}\, x + \frac{1}{2}\underbrace{V''(0)}_{=k>0}\, x^2 + \ldots} \quad (8.1)$$

escolhendo o nível 0 de energia

(mínimo

termos de ordem sup. (anarmonicidade)

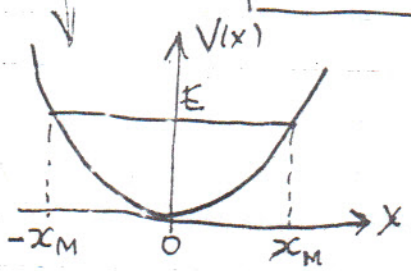
A aprox. de O.H. equivale a

$$\boxed{V(x) = \frac{1}{2} k x^2} \quad (8.2) \quad (-\infty < x < \infty)$$

"constante de mola"

$F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x} = -kx$

lei de Hooke



q é 1 potencial parabólico. Daí a gde. generalidade das aplics. do O.H.: aplica-se às peqs. oscils. de moléculas, de núcleos; extendido a mtos. partícs. aplica-se a 1 cristal (peqs. oscils. dos com da rede) (fônons); o cpo. em^co de rad. livre é como sist. dinâmico ≡ a 1 conj. ∞ de osciladores harmônicos (os "oscils. de rad." de Planck), assoc. aos modos de propag. monocromáticos de todas as freqs. possíveis; a quantiz. do cpo. e o conceito de fóton estão direta^te relacs. c/ a teoria quântica do O.H.. Por estas razões, é 1 dos sistemas físicos + importantes.

$$\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2} \quad (8.3)$$

Classica^te, o mov^to de 1 partíc. de energia E é confinado entre os ptos. de retorno $\pm x_M$,

$$E = \frac{1}{2} k x_M^2 \quad \left\{ \boxed{x_M = \sqrt{\frac{2E}{k}}} \right. \quad (8.4)$$

Espectro clássico: $0 \leq E < \infty$

e a partíc. descreve um MHS,

$$\boxed{x(t) = x_M \cos(\omega t + \varphi)} \quad (8.5)$$

onde

$$\ddot{x} = -\omega^2 x = \frac{F}{m} = -\frac{k}{m} x \quad \left\{ \quad \boxed{\omega^2 = \frac{k}{m}} \right. \quad (8.6)$$

de modo que

$$\boxed{V = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2} \quad (8.7)$$

Se tomarmos a <u>média temporal</u> sobre uma oscilação,

$$\overline{x^2} = x_M^2 \cdot \underbrace{\frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} \cos^2(\omega t + \varphi)\, dt}_{\overline{\cos^2(\omega t+\varphi)} = \frac{1}{2}}, \quad \tau = \frac{2\pi}{\omega}$$

vem

$$\boxed{\overline{x^2} = \frac{1}{2} x_M^2} \quad (8.8)$$

$$\boxed{\overline{\dot{x}^2} = \omega^2 x_M^2 \overline{\operatorname{sen}^2(\omega t + \varphi)} = \frac{1}{2} \omega^2 x_M^2} \quad (8.9)$$

o que dá

$$\left. \begin{aligned} \overline{T} &= \frac{1}{2} m \overline{\dot{x}^2} = \frac{1}{4} m \omega^2 x_M^2 \\ \overline{V} &= \frac{1}{2} m \omega^2 \overline{x^2} = \frac{1}{4} m \omega^2 x_M^2 \end{aligned} \right\} \quad \boxed{\overline{T} = \overline{V} = \frac{1}{2} \overline{E}} \quad (8.10)$$

($\overline{E} = E$)

(caso particular do teorema do virial)

8.2. O oscilador quântico 1-D

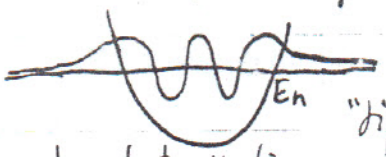
É definido pela Hamiltoniana

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2} \quad (8.11)$$

Podemos antecipar vários resultados por 1 discussão qualitativa.

(a) Como os estados clássicos de energia dada

são todos confinados, podemos esperar q o espectro de autovalores da energia seja total.te discreto, cl autovalores E_n (n inteiro), analog.te à partíc. numa caixa cl paredes ∞s. As autofunções devem corresponder aos valores de E_n pl os quais o comport.to "tipo oscilatório" dentro se junte liss.te cl 1 comport.to "tipo exponencial" de ambos os lados pura.te decrescente.



14ª aula: 19-10-92

(b) Pelo teor. de Ehrenfest,

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}\ , \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\left\langle\frac{\partial\hat{V}}{\partial x}\right\rangle = -m\omega^2\langle\hat{x}\rangle} \qquad (8.12)$$

o q dá

$$\boxed{\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}\rangle = \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\omega^2\langle\hat{x}\rangle} \qquad (8.13)$$

a eq de mov.to clássica (como tinha de ser), ou seja,

$$\boxed{\langle\hat{x}\rangle_{\psi_t} = x_0\cos(\omega t+\varphi)} \quad (8.14)\ , \quad \forall\,\psi(t).$$

Mas vimos (cf. (3.40)) que, se ψ_j = autofunção cl autovalor E_j, e $\psi = \sum c_j\psi_j$ ($\forall\,\psi$)

$$\boxed{\langle\hat{x}\rangle_\psi = \sum_{j,k} c_j^* c_k\,(\psi_j, \hat{x}\psi_k)\,e^{i(E_j-E_k)t/\hbar}} \qquad (8.15)$$

Como só $\exists$ uma frequência (ω) na (8.14), o intervalo mínimo entre 2 autovalores de energia deve ser $\geq \hbar\omega$ ($\Delta E_{jk} \geq \hbar\omega$); caso contrário, esperaríamos aparecer frequências $< \omega$ na (8.14).

(c) Como $V(-x) = V(x)$, podemos tomar autofunções cl paridade definida (pares ou ímpares)

8.3. Estados estacionários. Método direto

13ª aula - 24/09/91

$$\boxed{\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)} \qquad (8.16)$$

equivale a

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi(x) = E\varphi(x)} \qquad (8.17)$$

eq. diferencial q deve ser satisfeita pl $-\infty < x < \infty$; queremos

sols. <u>normalizáveis</u> dessa eq., ou seja, as únicas conds de contorno dizem respeito ao comportamento da sol. p/ $x \to \pm\infty$ (tem de ser tal q as $\int$ de normaliz. convirja).

Como $E/\hbar\omega$ é adimensional, podemos escrever a (8.17) em termos de <u>variáveis adimensionais</u> dividindo-a por $\hbar\omega$:

$$-\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{1}{2}\underbrace{\frac{m\omega}{\hbar}}_{=x^2/x_0^2} x^2\varphi = \frac{E}{\hbar\omega}\varphi \qquad x = s\,x_0 \quad \frac{ds}{dx} = \frac{1}{x_0}$$

$$\boxed{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x = \frac{x}{x_0} = s \quad ; \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} \quad (8.18) \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{ds}\frac{ds}{dx} = \frac{1}{x_0}\frac{d}{ds} \left\{ \frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{x_0^2}\frac{d^2}{ds^2} = \frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{ds^2} \right)$$

$$\Rightarrow \boxed{-\frac{1}{2}\frac{d^2\varphi}{ds^2} + \frac{1}{2}s^2\varphi = \frac{E}{\hbar\omega}\varphi} \xrightarrow{(8.19)} = \epsilon\varphi$$

$\frac{d}{dx}\left(\frac{d}{ds}\frac{ds}{dx}\right) = \frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{ds}\left(\frac{1}{x_0}\frac{d}{ds}\right) = \frac{d}{ds}\frac{ds}{dx}\left(\frac{1}{x_0}\frac{d}{ds}\right) = \frac{1}{x_0^2}\frac{d^2}{ds^2}$

$\frac{d}{dx} = \frac{d}{ds}\frac{ds}{dx} = \frac{1}{x_0}\frac{d}{ds}$

Comportamento assintótico p/ $|s| \to \infty$

Escrevendo a (8.19) como

$$\boxed{\frac{d^2\varphi}{ds^2} = s^2\varphi - \left(\frac{2E}{\hbar\omega}\right)\varphi} \quad (8.20) \qquad \left(\frac{2E}{\hbar\omega} = 2\epsilon\right)$$

$$\boxed{\frac{d^2\varphi}{ds^2} = (s^2 - 2\epsilon)\varphi}$$

vemos q, p/ $|s| \to \infty$, o último termo é desprezível, e a eq. tal se torna

$$\boxed{\frac{d^2\varphi}{ds^2} \sim s^2\varphi} \quad (8.21)$$

("assintótica" =).

$$\varphi \sim e^{cs^2} \Rightarrow \frac{d\varphi}{ds} \sim 2sce^{cs^2} \left\{ \frac{d^2\varphi}{ds^2} \sim 2ce^{cs^2} + 4s^2c^2e^{cs^2} \right.$$

$$= \underbrace{(4s^2c^2 + 2c)}_{\text{desprezível p/ } |s|\to\infty} e^{cs^2} \approx 4c^2s^2\underbrace{e^{cs^2}}_{\varphi} = s^2\varphi \Rightarrow 4c^2 = 1 \left\{ c = \pm\frac{1}{2} \right. \quad (8.22)$$

$$\boxed{\varphi \sim e^{\pm\frac{1}{2}s^2} \quad (|s| \to \infty)} \quad (8.23)$$

Comportamento assintótico $|s| \to \infty$

$$\frac{d^2\varphi}{ds^2} - s^2\varphi = -2\epsilon\varphi \quad (8.20)$$

$$\frac{1}{\varphi}\frac{d^2\varphi}{ds^2} - s^2 = -2\epsilon \quad (1)$$

Mud. de variável:

$$f(s) \equiv \frac{d}{ds}\ln\varphi(s) = \frac{1}{\varphi}\frac{d\varphi}{ds} \quad (2)$$

$$f'(s) = \frac{1}{\varphi}\frac{d^2\varphi}{ds^2} - \frac{1}{\varphi^2}\left(\frac{d\varphi}{ds}\right)^2 = \frac{1}{\varphi}\left(\frac{d^2\varphi}{ds^2}\right) - f^2(s) \quad (3)$$

(1) $\Rightarrow$

$$\Rightarrow \quad f' + f^2 = (s^2 - 2\epsilon) \quad (4)$$

P/ $s \to \infty$, $f^2 = \mathcal{O}(s^2)$, sugerindo

$$f(s) \approx as + b + \frac{c}{s} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{s^2}\right) \quad (5) \quad (|s| \to \infty)$$

$$f' \approx a - \frac{c}{s^2} + \mathcal{O}(s^{-3}) \quad (6)$$

$$f^2 \approx a^2s^2 + 2abs + b^2 + 2ac + \frac{2bc}{s} + \mathcal{O}(s^{-2}) \quad (7)$$

$$\therefore \quad f' + f^2 = a^2s^2 + 2abs + b^2 + 2ac + a + \frac{2bc}{s} + \mathcal{O}(s^{-2}) \quad (8)$$

Comparando com (4):

$$a^2 = 1 \;\{\; a = \pm 1 \quad (9), \qquad b = 0 \quad (10)$$

$$a(2c+1) = -2\epsilon \;\{\; c + \frac{1}{2} = -\frac{\epsilon}{a} = \mp\epsilon \;\{\; c = \mp\epsilon - \frac{1}{2} \quad (11)$$

o que dá

$$\left.\begin{aligned} f_+(s) &= s - \frac{(\epsilon+\frac{1}{2})}{s} + \mathcal{O}(s^{-2}) \\ f_-(s) &= -s + \frac{(\epsilon-\frac{1}{2})}{s} + \mathcal{O}(s^{-2}) \end{aligned}\right\} = \frac{d}{ds}\ln\varphi_\pm(s) \qquad (12)$$

$(|s|\to\infty)$

e, integrando em relação a s,

$$\begin{aligned} \ln\varphi_+(s) &= \frac{s^2}{2} - (\epsilon+\tfrac{1}{2})\ln s + \mathcal{O}(s^{-1}) \\ \ln\varphi_-(s) &= -\frac{s^2}{2} + (\epsilon-\tfrac{1}{2})\ln s + \mathcal{O}(s^{-1}) \end{aligned} \qquad (13) \quad (|s|\to\infty)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \varphi(s) &\approx c_+\,\varphi_+(s) + c_-\,\varphi_-(s) \\ &\approx c_+\, s^{-(\epsilon+\frac{1}{2})}\, e^{+\frac{1}{2}s^2} + c_-\, s^{\epsilon-\frac{1}{2}}\, e^{-\frac{1}{2}s^2} \end{aligned} \qquad (14)$$

$(|s|\to\infty)$

$\left(\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}\right)$

onde $e^{+\frac{1}{2}s^2}$ domina; p/ as autofunções, $c_+ = 0$

e $\varphi(s) \approx e^{-\frac{1}{2}s^2} \times$ (potência de s).

Mais simples:

$$f_\alpha(s) = s^\alpha e^{cs^2} \begin{cases} f'_\alpha(s) = 2sc\cdot s^\alpha e^{cs^2} + \alpha s^{\alpha-1} e^{cs^2} \\ f''_\alpha = 4c^2s^2 f_\alpha + 2(\alpha+1)c f_\alpha + 2c\alpha f_\alpha + \frac{\alpha(\alpha-1)}{s^2} f_\alpha \end{cases}$$

$$\therefore \quad f''_\alpha = \Big[4c^2s^2 + 2c(2\alpha+1) + \underbrace{\frac{\alpha(\alpha-1)}{s^2}}_{\mathcal{O}(s^{-2})}\Big] f_\alpha \qquad \varphi'' = (s^2 - 2\epsilon)\varphi$$

$$\left.\begin{aligned} 4c^2 &= 1 \\ \epsilon &= -c(2\alpha+1) \end{aligned}\right\} \begin{cases} \boxed{c_\pm = \pm\frac{1}{2}} \\ \end{cases}$$

$$\Rightarrow \epsilon_\pm = \mp(\alpha_\pm + \tfrac{1}{2}) \begin{cases} \alpha_\pm + \frac{1}{2} = \mp\epsilon \\ \end{cases} \boxed{\alpha_\pm = \mp\epsilon - \frac{1}{2}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\varphi(s) \approx c_+\, s^{-(\epsilon+\frac{1}{2})} e^{\frac{1}{2}s^2} + c_-\, s^{\epsilon-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}s^2}}$$

a menos de factores q se comportam + lentamente $\not\mu$ $|s| \to \infty$; $\not\mu$ ex.,

$$s^n e^{\pm \frac{1}{2}s^2} \underset{\text{dominado por}}{\sim} e^{\pm \frac{1}{2}s^2} \quad \not\mu \ |s| \to \infty \qquad (8.24)$$

Tomando ln, $n \ln s \pm \frac{1}{2}s^2 \sim \pm \frac{1}{2}s^2$ ($\ln s / s^2 \to 0$)

P/ 1 autofunção normalizável, é preciso q a (8.24) valha com sinal (−) $\not\mu$ $s \to \infty$ como $\not\mu$ $s \to -\infty$, o q deve definir os autovalores de E (analogia cl o poço de pot.).

É interessante então efetuar a mud. de variável

$$\varphi(s) = e^{-\frac{1}{2}s^2} f(s) \qquad (8.25)$$

onde $f(s)$ tem de ser tal que $e^{-\frac{1}{2}s^2}$ domine $\not\mu$ $s \to \pm\infty$. P/ E ∀, em geral, deve resultar

$$f(s) \sim e^{s^2} \ (s \to \pm\infty), \ E \neq \text{autovalor} \qquad (8.26)$$

e isto só deve deixar de valer $\not\mu$ E = autovalor.

$$\frac{d\varphi}{ds} = -s e^{-\frac{1}{2}s^2} f(s) + e^{-\frac{1}{2}s^2} \frac{df}{ds}$$

$$\frac{d^2\varphi}{ds^2} = s^2\varphi - 2s e^{-\frac{1}{2}s^2} \frac{df}{ds} + e^{-\frac{1}{2}s^2} \frac{d^2f}{ds^2} \qquad (8.27)$$

($-e^{-\frac{1}{2}s^2} f$)

∴ a (8.20) fica

$$-2\epsilon\, f e^{-\frac{1}{2}s^2} = \frac{d^2\varphi}{ds^2} - s^2\varphi = e^{-\frac{1}{2}s^2}\left(-2s\frac{df}{ds} + \frac{d^2f}{ds^2} - f\right)$$

$$\frac{d^2f}{ds^2} - 2s\frac{df}{ds} + (2\epsilon - 1) f = 0 \qquad (8.28)$$

Vamos procurar resolver esta eq. sob a forma de uma <u>série de potências</u>, cl a cond. de contorno (método de Frobenius)

$$f(s) \ \underline{\text{não}} \text{ deve comportar-se como } e^{s^2} \not\mu \ s \to \pm\infty \qquad (8.29)$$

$$f(s) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j s^j \qquad (8.30)$$

→ N pode haver potências < 0 pq $f(0)$ tem de ser regular

procurando determinar os coefs. c_j $\not\mu$ satisfazer as (8.28)+(8.29)

$$f'(s) = \sum_{j=1}^{\infty} j c_j s^{j-1}$$

$$f''(s) = \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1) c_j s^{j-2}$$

$$0 = f''(s) - 2s f'(s) + (2\epsilon - 1) f =$$

$$= \sum_{j=2}^{\infty} \underbrace{j(j-1) c_j s^{j-2}}_{j-2 = j' \Rightarrow j = (j'+2)} - 2\sum_{j=1}^{\infty} j c_j s^j + (2\epsilon - 1)\sum_{j=0}^{\infty} c_j s^j$$

$$= \boxed{\sum_{j=0}^{\infty} \left\{ (j+2)(j+1) c_{j+2} - 2j c_j + (2\epsilon - 1) c_j \right\} s^j = 0} \quad (8.31)$$

P/ q isto valha $\forall s$, temos de ter

$$(j+1)(j+2) c_{j+2} = (2j - 2\epsilon + 1) c_j$$

A sol. geral é 1 superpos. das 2, tem 2 coefs. arbitrs. (c_0 e c_1)

ou seja

$$\boxed{\frac{c_{j+2}}{c_j} = \frac{2\left(j + \frac{1}{2} - \epsilon\right)}{(j+1)(j+2)}} \quad (8.32) \quad (j = 0, 1, 2, \ldots)$$

↑ que, pela (8.32), tem de ser c_0 ou c_1 (se $c_0 = c_1 = 0$, todos os demais seriam = 0)

Como as sols. têm paridade definida, podemos começar c/ 1 pot. par ou ímpar de s; uma vez definido o 1º coeficiente $\neq 0$ da série de pots. (a sol. é ∥ a menos de 1 fator de normalização), todos os demais coefs. são definidos pela rel. de recorrência (8.32).

P/ verificar se a (8.29) é ou n̄ satisfeita, basta olhar p/ o comportº dos coefs. p/ $j \to \infty$ ($\forall$ n.º finito de termos é 1 polinômio, desprezível frente a e^{s^2} qdo $s \to \pm\infty$). P/ $j \to \infty$, a (8.32) dá

$$\boxed{\frac{c_{j+2}}{c_j} \approx \frac{2}{j}\left(+ O(j^{-2})\right), \quad j \to \infty} \quad (8.33)$$

contando que o numerador n̄ se anule p/ nenhum valor de j (se se anular p/ $j = n$, todos os termos posteriores são = 0).

Mas

$$\boxed{e^{s^2} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(s^2)^j}{j!}} \quad (8.34) \quad = \sum_{j=0}^{\infty} a_j s^j$$

$$-\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2\varphi = \frac{E}{\hbar\omega}\varphi \qquad \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x = \frac{x}{x_0} = s \qquad \left(\frac{x^2}{x_0^2}\right)$$

onde, tomando j par,

$$a_j = \frac{1}{(\frac{1}{2}j)!}$$

$$a_{j+2} = \frac{1}{[\frac{1}{2}(j+2)]!} = \frac{1}{(\frac{1}{2}j+1)!}$$

$$\boxed{\frac{a_{j+2}}{a_j} = \frac{1}{(\frac{1}{2}j+1)} \approx \frac{2}{j}} \qquad (8.34)$$

q é o mmo. comportº (8.33).

Logo, a menos q o numerador da (8.32) se anule p/ $j=n$ (algum valor inteiro), a sol. $f(s)$ terá fatalº o comportº dominado por $\exp(s^2)$ p/ $s \to \pm\infty$. Se o numerador se anula, a série p/ $f(s)$ se reduz a um polinômio em s, o q satisfaz a (8.29a) ($\bar{n}$ afeta o fator dominante $\exp(-s^2/2)$ na (8.25)).

Lembrando que $\epsilon = E/\hbar\omega$, os autovalores E_n da energia são então determinados por

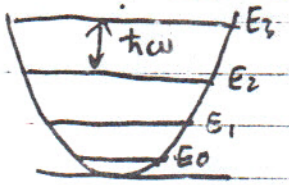
$$\left(n+\frac{1}{2}\right) - \epsilon_n = \left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{E_n}{\hbar\omega} = 0 \qquad (n = 0,1,2,\ldots)$$

$c_{n+2} = 0, \ldots$ polinômio de grau n

ou seja,

$$\boxed{E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n=0,1,2,\ldots)} \qquad (8.35)$$

são os autovalores da energia do O.H. quântico. Vemos q. eles são = de espaçados, cl espaçº



$$\boxed{\Delta E = \hbar\omega} = E_n - E_{n-1} \qquad (8.36)$$

o q concorda cl o resultado anterior $\Delta E \geq \hbar\omega$

Probl. 30. Construa as três primeiras autofunções $\psi_n(x,t)$ $(n=0,1,2)$ (não normalizadas) e mostre que são ortogonais

---

8.4. Método algébrico (fatorização)

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{ds^2} \qquad \hat{x}^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\hat{s}^2$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{m\omega}\hat{s}^2$$

$$= -\frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial s^2} - \hat{s}^2\right)$$

MEC/FENAME

ou seja,

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{s}^2 - \frac{\partial^2}{\partial s^2}\right) \quad (8.37)$$

o que sugere a <u>fatorização</u> em $\left(\hat{s} - \frac{\partial}{\partial s}\right)\left(\hat{s} + \frac{\partial}{\partial s}\right)$.

Temos:

$$\left(\hat{s} - \frac{\partial}{\partial s}\right)\left(\hat{s} + \frac{\partial}{\partial s}\right) = \hat{s}^2 - \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \underbrace{\hat{s}\frac{\partial}{\partial s} - \frac{\partial}{\partial s}\hat{s}}_{\left[\hat{s}, \frac{\partial}{\partial s}\right]} \quad (8.38)$$

Se representarmos as autofunções como funções de s, $\varphi(s)$,

$$\left[\hat{s}, \frac{\partial}{\partial s}\right]\varphi(s) = s\frac{\partial\varphi}{\partial s} - \frac{\partial}{\partial s}(s\varphi) = -\varphi$$

$\therefore$

$$\left[\hat{s}, \frac{\partial}{\partial s}\right] = -\hat{1} \quad (8.39)$$

e a (8.38) dá

$$\hat{s}^2 - \frac{\partial^2}{\partial s^2} = \left(\hat{s} - \frac{\partial}{\partial s}\right)\left(\hat{s} + \frac{\partial}{\partial s}\right) + \hat{1} \quad (8.40)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega\left\{\frac{1}{2}\left(\hat{s} - \frac{\partial}{\partial s}\right)\left(\hat{s} + \frac{\partial}{\partial s}\right) + \dots \right. \quad (8.40a)$$

Na notação de Dirac,

$$\left.\begin{array}{l} \langle x|\psi\rangle = \psi(x) \\ \langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} \end{array}\right\} \quad \langle x|\hat{p} = -i\hbar\langle x|\frac{d}{dx} \quad (8.41)$$

$\hat{p}|\psi\rangle$ — função de onda associada a $\hat{p}|\psi\rangle$

↙ Def. de $\hat{p}$ na representação de configuração

Analogamente, vamos introduzir um operador $\hat{a}$ por

$$\langle s|\varphi\rangle = \varphi(s) \quad (8.42)$$

Representação de configuração em termos de s ($\equiv x$)

e

$$\langle s|\hat{a} = \frac{\langle s|}{\sqrt{2}}\left(\hat{s} + \frac{d}{ds}\right) \quad (8.43)$$

$$s = \frac{x}{x_0} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x \qquad \left\{\begin{array}{l} \hat{s} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x}) \\ \frac{\partial}{\partial s} = x_0\frac{\partial}{\partial x} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x} = i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) = \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{p} \end{array}\right\}$$

Logo,

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega\hat{x} + i\hat{p}\right) \qquad (8.44)$$

na represent. de $\langle s|$

operador não-hermiteano!

O operador hermiteano conjugado é:

$$\langle s|\hat{a}^+ = \frac{\langle s|}{\sqrt{2}}\left(\hat{s} - \frac{\partial}{\partial s}\right) \qquad (8.44)$$

o q equivale a trocar i por $-i$ na (8.44).
(sabemos que $\left(\frac{\partial}{\partial s}\right)^+ = -\frac{\partial}{\partial s}$)

A (8.40a) dá, nesta represent.,

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\underbrace{\hat{a}^+\hat{a}}_{=\hat{n}} + \frac{1}{2}\right) \qquad (8.45)$$

$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{s} + \frac{\partial}{\partial s}\right)$

ou ainda,

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right) \qquad (8.46)$$

$\hat{n}^+ = (\hat{a}^+\hat{a})^+ = \hat{a}^+\hat{a}$

$\hat{a}^+\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+$

onde introduzimos o operador

$$\hat{n} \equiv \hat{a}^+\hat{a} \qquad (8.47)$$

Note que $\hat{n}^+ = \hat{n}$ (8.47a)

(Hermiteano)
como dito de ser, pela (8.46)

$$\left.\begin{aligned}\hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{s} + \frac{\partial}{\partial s}\right)\\ \hat{a}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{s} - \frac{\partial}{\partial s}\right)\end{aligned}\right\} [\hat{a}, \hat{a}^+] = \frac{1}{2}\left[\hat{s} + \frac{\partial}{\partial s}, \hat{s} - \frac{\partial}{\partial s}\right]$$

$$= -\frac{1}{2}\left[\hat{s}, \frac{\partial}{\partial s}\right] + \frac{1}{2}\left[\frac{\partial}{\partial s}, \hat{s}\right] = \frac{2\hat{1}}{2} = \hat{1}$$

$-\hat{1}$ $\quad\uparrow$

ou seja, pela (8.39),

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = \hat{1} \qquad (8.48)$$

$[\hat{a}^+, \hat{a}] = \hat{a}^+\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^+ =$

$= -(\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a})$

~~Vamos ver agora que a~~ o que, pela (8.44), equivale à rel. de comutação de Heisenberg $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, expressa em termos de $\hat{a}, \hat{a}^+$. Vamos ver agora que as (8.46) a (8.48) são suficientes pl determinar os autovalores – e dps as autofunções – de $\hat{H}$, por 1 método puramente algébrico.

8.5. Autovalores de $\hat{n}$

Como $\forall$ auto vector de estado de $\hat{n}$ é 1 autovector de $\hat{n}$, o probl. de autovalores p/ $\hat{A}$ se reduz ao de obter os autovalores de $\hat{n}$.

Comutadores de $\hat{a}$ e $\hat{a}^+$ c/ $\hat{n}$

$$[\hat{a}, \hat{n}] = [\hat{a}, \hat{a}^+\hat{a}] = \hat{a}^+ \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}]}_{=0} + \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^+]}_{=\hat{1}} \hat{a}$$

$$\therefore \boxed{[\hat{a}, \hat{n}] = \hat{a}} \quad (8.49)$$

$[\hat{a}, \hat{a}^+\hat{a}] = \hat{a}^+ \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}]}_{=0} + \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^+]}_{=\hat{1}} \hat{a}$

Tomando o hermit. conj. de ambos os membros,

$$\boxed{[\hat{n}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+} \quad (8.50) \qquad [\hat{n}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+$$

16ª aula – 11-5

Autovalores de $\hat{n}$

Seja $|n\rangle$ um autovetor:

$$\boxed{\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle} \quad (8.51)$$

$$\boxed{\langle n|n\rangle = 1}$$

Temos então

$$\left.\begin{aligned} &\langle n|\hat{n}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n \\ &= \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \|\hat{a}|n\rangle\|^2 \end{aligned}\right\} \; n \geq 0 \quad (8.52)$$

ou seja, o espectro de autovalores de $\hat{n}$ é limitado inferiormente por 0 (i.e. pode haver autovalores < 0).

Apliquemos agora ambos os membros da (8.49) a $|n\rangle$:

$$\underbrace{\hat{a}\,\hat{n}|n\rangle}_{n\hat{a}|n\rangle} - \hat{n}\,\hat{a}|n\rangle = \hat{a}|n\rangle$$

$$\therefore \boxed{\hat{n}(\hat{a}|n\rangle) = (n-1)(\hat{a}|n\rangle)} \quad (8.53)$$

ou seja, se $\hat{a}|n\rangle \neq 0$, este ket é 1 autovetor de $\hat{n}$ associado ao autovalor $(n-1)$:

ñ podemos dizer "o" autovetor pq. poderia haver degenerescência (provaremos depois q ñ há)

17ª aula - 16-5

$$\boxed{\hat{a}|n\rangle = c_n|n-1\rangle} \quad (8.54)$$

Aplicando novamte $\hat{a}$ a $|n-1\rangle$, se o result. é $\neq 0$, ele é 1 autovetor de $\hat{n}$ assoc. ao autovalor $(n-2)$, e assim por diante: aplicando $\hat{a}$ a um autovetor de n, o resultado é ~~[illegible]~~; ou zero, ou 1 novo autovetor, c/ autovalor $(n-1)$: por isso, $\hat{a}$ se chama 1 operador de abaixamento. ~~[illegible]~~

Se $n \neq$ inteiro$^{\geq 0}$, podemos ir abaixando o autovalor indefinidamte, chegando ∴ a autovalores < 0. Mas isso, pela (8.52), é impossível. Logo,

$$\boxed{n = \text{inteiro}^{\geq 0} = 0, 1, 2, \ldots} \quad (8.55)$$

e a (8.46) dá

$$\boxed{\hat{H}|n\rangle = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle = E_n|n\rangle} \quad (8.56)$$

ou seja, novamte,

$$\boxed{E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega} \quad (8.57) \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

Além disto, $n = 0$ caracteriza-se por

$$\boxed{\hat{a}|0\rangle = 0} \quad (8.58)$$

De modo geral, na (8.54),

$$\|\hat{a}|n\rangle\|^2 = \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n = |c_n|^2 \underbrace{\langle n-1|n-1\rangle}_{=1}$$

$$\therefore \quad \boxed{|c_n|^2 = n} \quad (8.59)$$

A (8.58) é 1 caso partic. c/ $n = 0$.

Operador de levantamento

Apliquemos ambos os membros da (8.50) a $|n\rangle$:

$$[\hat{n}, \hat{a}^+]|n\rangle = \hat{a}^+|n\rangle$$
$$\hat{n}\hat{a}^+|n\rangle - \underbrace{\hat{a}^+\hat{n}|n\rangle}_{n\hat{a}^+|n\rangle} = \hat{a}^+|n\rangle$$

$$\boxed{\hat{n}\left(\hat{a}^+|n\rangle\right) = (n+1)\left(\hat{a}^+|n\rangle\right)} \quad (8.60)$$

o que dá

$$\boxed{\hat{a}^+|n\rangle = d_n|n+1\rangle} \quad (8.60)$$

$|n+1\rangle$ = UM autovetor de $\hat{n}$ cl autovalor $(n+1)$

onde

$$\boxed{\| \hat{a}^+|n\rangle\|^2 = \langle n|\underbrace{\hat{a}\hat{a}^+}_{=\hat{a}^+\hat{a}+\hat{1}}|n\rangle = \langle n|(\hat{n}+\hat{1})|n\rangle = (n+1)} \quad (8.61)$$

o que é sempre >0 $(n \geq 0)$, de modo que

$$\boxed{|d_n|^2 = n+1} \quad (8.62) \qquad (\text{pois } \langle n+1|n+1\rangle = 1)$$

A (8.60) mostra que $\hat{a}^+$ é um <u>operador de levantamento</u>: aumenta de 1 o autovalor de n, qdo. aplicado a um autovetor de $\hat{n}$. Os operadores $\hat{a}, \hat{a}^+$ são chamados "<u>operadores de escada</u>": um abaixa de uma unidade e outro levanta de uma unidade o autovalor de n.

Probl. 31. Demonstre que

$$\boxed{[\hat{a}, (\hat{a}^+)^n] = n(\hat{a}^+)^{n-1}} \quad (8.63)$$

8.6. Autovetores de $\hat{H}$

Vamos começar mostrando q os autoestados são <u>não-degenerados</u>. P/isto, comecemos cl o estado fundamental, definido por

$$\hat{a}|0\rangle = 0.$$

Na representação $\langle s|$, isto dá, cl

$$\boxed{\langle s|0\rangle = \varphi_0(s)} \quad (8.64)$$

pela (8.43)

$$0 = \langle s|\hat{a}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle s|\left(\hat{s} + \frac{\partial}{\partial s}\right)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(s\varphi_0(s) + \frac{\partial \varphi_0}{\partial s}\right)$$

ou seja,

$$\boxed{\frac{d\varphi_0(s)}{ds} = -s\,\varphi_0(s)} \quad (8.65)$$

eq. ≠al de 1ª ordem cuja solução unívoca é

$$\boxed{\varphi_0(s) = \varphi_0(0)\,e^{-\frac{1}{2}s^2} = N e^{-\frac{1}{2}s^2}} \quad (8.66)$$

$N = c_0$: polinômio de grau 0

o que concorda c/ a disc. anterior pelo método direto; N é a constante de normalização q discutiremos posteriormente. Logo, o estado fundamental é não-degenerado.

P/ demonstrar q todos são, podemos proceder por indução completa: vamos mostrar que, se $|n\rangle$ é não-degenerado, $|n+1\rangle$ também é.

15ª aula - 21-10

Seja $|n+1\rangle$ um autovetor de $\hat{n}$ c/ autovalor $(n+1)$; vamos mostrar que é único (a menos de 1 fator de fase, como ∀ autovetor). P/ isto, notemos que

$$\boxed{\hat{a}|n+1\rangle = c_{n+1}|n\rangle} \quad (8.67)$$

onde $|n\rangle$, no 2º membro, é o autovetor único (por hipótese) de $\hat{n}$ assoc. ao autovalor n. Aplicando $\hat{a}^+$ a ambos os membros, vem

$$\hat{a}^+\hat{a}|n+1\rangle = (n+1)|n+1\rangle = c_{n+1}\hat{a}^+|n\rangle$$

$$\therefore \boxed{|n+1\rangle = \frac{c_{n+1}}{(n+1)}\underbrace{\left(\hat{a}^+|n\rangle\right)}_{= d_n|n+1\rangle}} \quad (8.68) \qquad \boxed{\frac{d_n\,c_{n+1}}{n+1} = 1}$$

q se exprime unívoca de (a menos do fator de fase arbitr. em c_{n+1}) em função do vetor unívoco $|n\rangle$. Logo, $|n+1\rangle$ tb. é unívoco ($\hat{n}$-degenerado), QED.

Construção algébrica dos autovetores

Como os estados $|n\rangle$ são não degenerados, podemos obter o estado $|n+1\rangle$ a partir de $|n\rangle$ pela (8.60), bastando definir o fator de fase arbitrário em d_n pela escolha (cf. (8.62))

$$\boxed{d_n = \sqrt{n+1}} \quad (8.69)$$

Pela (8.68), isto tb. ⇒

$$c_{n+1} = \sqrt{n+1}$$

$$\therefore \boxed{c_n = \sqrt{n}} \quad (8.69a)$$

6)

que dá

$$\boxed{\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle} \quad (8.70)$$

$$\left\{ \boxed{|n+1\rangle = \frac{\hat{a}^+|n\rangle}{\sqrt{n+1}}} \quad (8.70a) \right. \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

Por construção, isto já dá os autovetores normalizados, partindo de $\langle 0|0\rangle = 1$. Cf efeito,

$$\langle n+1|n+1\rangle = \frac{1}{(n+1)}\langle n|\underbrace{\hat{a}\,\hat{a}^+}_{=\hat{n}+1}|n\rangle = \frac{(n+1)}{(n+1)}\langle n|n\rangle = \langle n|n\rangle$$

Temos então, sucessivamente,

$$|1\rangle = \frac{\hat{a}^+|0\rangle}{\sqrt{1}}$$

$$|2\rangle = \frac{\hat{a}^+|1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{(\hat{a}^+)^2}{\sqrt{1\cdot 2}}|0\rangle$$

$$|3\rangle = \frac{\hat{a}^+|2\rangle}{\sqrt{3}} = \frac{(\hat{a}^+)^3}{\sqrt{1\cdot 2\cdot 3}}|0\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^3}{\sqrt{3!}}|0\rangle$$

. . . . .

o q sugere o result. geral

$$\boxed{|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle} \quad (8.71)$$

Cf efeito, se isto vale p/ n, a (8.70) dá

$$|n+1\rangle = \frac{\hat{a}^+}{\sqrt{(n+1)}}\,\frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}|0\rangle,$$

de modo q tb. vale p/ $(n+1)$. Logo, a (8.71) fica demonstrada, por indução completa.

$$\hat{a}|n\rangle = \frac{\hat{a}(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left[(\hat{a}^+)^n\hat{a} + n(\hat{a}^+)^{n-1}\right]|0\rangle$$

(pela (8.63))

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left[(\hat{a}^+)^n\underbrace{\hat{a}|0\rangle}_{=0} + n\,\underbrace{(\hat{a}^+)^{n-1}|0\rangle}_{\sqrt{(n-1)!}\,|n-1\rangle}\right]$$

$$\therefore \quad \boxed{\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle} \quad (8.72)$$

o que concorda cf a (8.69a)

mostrando que na (8.59) tb. o fator de fase = 1.

Como os $|n\rangle$ são não-degenerados, e são autovetores de um operador hermiteano ($\hat{H}$), temos

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n,n'} \quad (8.73)$$ Rel. de ortonormalidade

e os autovetores devem formar um conjunto completo:

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \hat{1} \quad (8.74)$$

14ª aula (26/9/91)

Probl. 32. O vetor $|\lambda\rangle$ é definido por

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (8.75) \qquad \lambda \in \mathbb{C} \ \forall$$

- Mostre que

$$\hat{a}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \ , \quad \langle\lambda|\hat{a}^+ = \lambda^*\langle\lambda| \quad (8.76)$$

Probl. 33. Mostre que, da def. do probl. 32,

$$\langle\mu|\lambda\rangle = e^{\mu^*\lambda} \quad (8.77)$$

(o q permite normalizar $|\lambda\rangle$, multiplicando-o por $e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2}$; os vetores normalizados chamam-se estados coerentes)

Probl. 34. Mostre que, na base $|n\rangle$, os únicos elementos de matriz $\neq 0$ de $\hat{a}$ e $\hat{a}^+$ são

$$\langle n|\hat{a}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}$$
$$\langle n+1|\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1} \quad (8.78)$$

de modo que

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \qquad \hat{a}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (8.79)$$

8.7. Funções de onda e Polinômios de Hermite

Podemos agora obter as autofunções na representação de configuração (ou de s, o que é equivalente):

$$\boxed{\langle s|n\rangle = \varphi_n(s)} \quad (8.80)$$

Já vimos que $\varphi_0(s) = N e^{-\frac{1}{2}s^2}$

Normalização: $-\infty < x < \infty \Rightarrow -\infty < s < \infty$

Normaliz. em x / Tb. poderíamos normalizar em s (fato $\pi^{-1/4}$) e depois multipl. por $\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(x)|^2 dx = 1 \qquad x = x_0 s \qquad \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(s)|^2 ds = \frac{1}{x_0} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}} \quad (8.81)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2} ds = \text{[redacted]} = \sqrt{\pi}$$

[redacted]

$$\boxed{\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}$$

Logo,

$$\boxed{\varphi_0(s) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}s^2}} \quad (8.82)$$

ou, na variável x,

$$\boxed{\begin{aligned} \varphi_0(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad \left(E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}\right) \\ \psi_0(x,t) &= \varphi_0(x)\, e^{-iE_0 t/\hbar} = \varphi_0(x)\, e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{aligned}} \quad (8.83$$

ESTADO FUNDAMENTAL do O.H.

Por outro lado, pela (8.70a),

$$\varphi_{n+1}(s) = \langle s|n+1\rangle = \frac{\langle s|\hat{a}^+|n\rangle}{\sqrt{n+1}} \quad \ldots$$

$$(8.44)\left\{ \langle s|\hat{a}^+ = \frac{\langle s|}{\sqrt{2}}\left(\hat{s} - \frac{\partial}{\partial s}\right) \right.$$

$$\varphi_{n+1}(s) = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}}\left(s - \frac{\partial}{\partial s}\right)\underbrace{\langle s|n\rangle}_{\varphi_n(s)}$$

ou seja,

$$\boxed{\varphi_{n+1}(s) = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}}\left(s - \frac{d}{ds}\right)\varphi_n(s)} \quad (8.84)$$

que, como foi mostrado, já leva automaticamente (uma vez que φ_0 foi normalizado) à função de onda normalizada.

$$\underline{\left(s - \frac{d}{ds}\right)\left(e^{-\frac{1}{2}s^2}\right) = 2s\, e^{-\frac{1}{2}s^2}}$$

$\therefore$

$$\varphi_1(s) = \frac{1}{\sqrt{2\times 1}}\left(s - \frac{d}{ds}\right)\varphi_0(s) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{\varphi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\cdot 1}} \cdot 2s\, e^{-\frac{1}{2}s^2}} \quad (8.83)$$

Normalizado em x

$$\left(s - \frac{d}{ds}\right)\left[2s\, e^{-\frac{1}{2}s^2}\right] = 2s^2 e^{-\frac{1}{2}s^2} - 2\underbrace{\frac{d}{ds}\left(s\, e^{-\frac{1}{2}s^2}\right)}_{e^{-\frac{1}{2}s^2} - s^2 e^{-\frac{1}{2}s^2}}$$

$$= \underline{(4s^2 - 2)\, e^{-\frac{1}{2}s^2} = \left(s - \frac{d}{ds}\right)^2\left(e^{-\frac{1}{2}s^2}\right)}$$

$\therefore$

$$\varphi_2(s) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\cdot 2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\cdot 1}}\,(4s^2 - 2)\, e^{-\frac{1}{2}s^2}$$

$$\boxed{\varphi_2(s) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{(\sqrt{2})^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2!}}\,(4s^2 - 2)\, e^{-\frac{1}{2}s^2}} \quad (8.84)$$

$$\left(s - \frac{d}{ds}\right)\left[(4s^2 - 2)\, e^{-\frac{1}{2}s^2}\right] = (4s^3 - 2s)e^{-\frac{1}{2}s^2} - \left\{8s\, e^{-\frac{1}{2}s^2} - s(4s^2 - 2)\, e^{-\frac{1}{2}s^2}\right\}$$

$$= e^{-\frac{1}{2}s^2}\left(4s^3 - 2s - 8s + 4s^3 - 2s\right)$$

$$= \underline{(8s^3 - 12s)\, e^{-\frac{1}{2}s^2} = \left(s - \frac{d}{ds}\right)^3\left(e^{-\frac{1}{2}s^2}\right)}$$

$$\varphi_3(s) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\cdot 3}}\left(s - \frac{d}{ds}\right)\left[(4s^2 - 2)\, e^{-\frac{1}{2}s^2}\right]$$

$$\boxed{\varphi_3(s) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{(\sqrt{2})^3} \frac{1}{\sqrt{3!}}\,(8s^3 - 12s)\, e^{-\frac{1}{2}s^2}} \quad (8.85)$$

Normalizada em x

$\therefore$

$$\boxed{\varphi_n(s) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{2^{n/2}} \frac{1}{(n!)^{1/2}}\, H_n(s)\, e^{-\frac{1}{2}s^2}} \quad (8.86)$$

$(n = 0, 1, 2, \ldots)$

onde $H_n(s)$ é 1 polinômio definido por

$$H_n(s) = e^{\frac{1}{2}s^2}\left(s - \frac{d}{ds}\right)^n e^{-\frac{1}{2}s^2} \qquad (8.87)$$

Polinômio de Hermite

com

$$\begin{aligned} H_0(s) &= 1 \\ H_1(s) &= 2s \\ H_2(s) &= 4s^2 - 2 \\ H_3(s) &= 8s^3 - 12s \\ &\cdots \end{aligned} \qquad (8.87)$$

Logo, $\varphi_n(s) = \mathcal{O}(s^n e^{-\frac{1}{2}s^2})$ para $s \to \pm\infty$, concordando c/ a (14) da pg. 136b, onde $\epsilon - \frac{1}{2} = \frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} = n$

Logo, $H_n(s)$ é 1 polinômio de grau n em s, contendo só potências pares p/ n par e só pots. ímpares p/ n ímpar, o q concorda c/ a discussão pelo método direto.

Probl. 35. Mostre que as relações

$$\begin{aligned} \varphi_n(s) &= \frac{1}{\sqrt{2n}}\left(s - \frac{d}{ds}\right)\varphi_{n-1}(s) \\ \varphi_{n-1}(s) &= \frac{1}{\sqrt{2n}}\left(s + \frac{d}{ds}\right)\varphi_n(s) \end{aligned} \qquad (8.88)$$

(corresp. a $|n-1\rangle = \frac{\hat{a}|n\rangle}{\sqrt{n}}$).

implicam

$$\begin{aligned} H_n(s) &= \left(2s - \frac{d}{ds}\right)H_{n-1}(s) \\ H_{n-1}(s) &= \frac{1}{2n}\frac{dH_n}{ds} \end{aligned} \qquad (8.89)$$

e use estas rels. p/ obter H_1, H_2, H_3, H_4, H_5 a partir de $H_0(s) = 1$.

Probl. 36. Elimine H_{n-1} das (8.89) para obter a eq. diferencial do polinômio de Hermite

$$\frac{d^2H_n}{ds^2} - 2s\frac{dH_n}{ds} + 2nH_n = 0. \qquad (8.90)$$

Verifique que os quatro primeiros polinômios satisfazem a esta equação.

Probl. 37. Elimine $\frac{dH_n}{ds}$ das (8.89) para obter a relação

$$\boxed{H_{n+1}(s) - 2s H_n(s) + 2n H_{n-1}(s) = 0} \quad (8.91)$$

Probl. 38. Na representação s, seja

$$\boxed{\langle s|\lambda\rangle = \psi_\lambda(s)} \quad (8.92)$$

onde $|\lambda\rangle$ é o vetor (8.75), com $\langle\lambda|\lambda\rangle = e^{|\lambda|^2}$ (cf. (8.77)).

$$\hat{a}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \equiv \boxed{\frac{1}{\sqrt{2}}\left(s + \frac{d}{ds}\right)\psi_\lambda(s) = \lambda\psi_\lambda(s)} \quad (8.93)$$

Mostre que a sol. desta equação (a menos de 1 fator de fase) c/ $(\psi_\lambda, \psi_\lambda) = e^{|\lambda|^2}$ é

$$\boxed{\psi_\lambda(s) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{\frac{1}{2}|\lambda|^2} e^{-\frac{1}{2}(s-\sqrt{2}\lambda)^2}} \quad (8.94)$$

e verifique que

$$\boxed{\psi_\lambda(s) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(s) \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}} \quad (8.95)$$

Mostre daí que, a menos de um fator de fase,

$$\boxed{e^{2sw - w^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{w^n}{n!} H_n(s)} \quad (8.96)$$

Função geratriz dos polinômios de Hermite (pq gera todos qdo. expandida em série de Taylor)

e que o fator de fase é 1, tomando $w = 0$.

17ª aula - 16/5

Expansão em autofunções

Para um vetor de estado $\forall$, $|\varphi\rangle$, a (8.74) dá

$$\boxed{|\varphi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|\varphi\rangle} \quad (8.97)$$

ou seja

$$\boxed{\langle s|\varphi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle s|n\rangle\langle n|\varphi\rangle} \quad (8.98)$$

onde

$$\boxed{\langle s|\varphi\rangle = \varphi(s), \quad \langle s|n\rangle = \varphi_n(s)} \quad (8.99)$$

MEC/FENAME

Se interpretarmos o prod. escalar como $\int_{-\infty}^{\infty} ds$ e não $\int_{-\infty}^{\infty} dx$, o fator de normalização $\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}$ na (8.82) deve ser omitido (cf. (8.81)), e estes resultados se escrevem

$$\varphi(s) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(s) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}s^2} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{2^{-n/2}}{\sqrt{n!}} H_n(s) \qquad (8.91)$$

onde

$$c_n = \langle n|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} ds\, \varphi(s)\varphi_n(s) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{2^{-n/2}}{\sqrt{n!}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}s^2} H_n(s)\varphi(s)\, ds \qquad (8.92)$$

As (8.91), (8.92) correspondem à <u>expansão em funções de Hermite</u> (análoga à exp. em série de Fourier p/ a partíc. numa caixa).

<u>Outra expressão p/ $H_n(s)$</u>

P/ uma função $f(s)$ $\forall$, demos, como é fácil verificar,

$$\left(\frac{d}{ds} - s\right) f = e^{\frac{s^2}{2}} \frac{d}{ds}\left(e^{-\frac{s^2}{2}} f\right) \qquad (8.93)$$

$\therefore$

$$H_1(s) = -e^{\frac{s^2}{2}}\left(\frac{d}{ds} - s\right) e^{-\frac{s^2}{2}} = -e^{s^2}\frac{d}{ds}\left(e^{-s^2}\right)$$

$$H_2(s) = +e^{\frac{s^2}{2}}\left(\frac{d}{ds} - s\right)^2 e^{-\frac{s^2}{2}} = e^{\frac{s^2}{2}}\left(\frac{d}{ds} - s\right)\left[e^{\frac{s^2}{2}}\frac{d}{ds}\left(e^{-s^2}\right)\right]$$

$$= e^{\frac{s^2}{2}} \frac{d^2}{ds^2}\left(e^{-s^2}\right)$$

$\therefore$

$$H_2(s) = e^{s^2}\frac{d^2}{ds^2}\left(e^{-s^2}\right)$$

$$H_{n+1}(s) = -e^{s^2}\frac{d}{ds}\left[e^{-s^2} H_n(s)\right]$$

↓ indução completa.

$$H_n(s) = (-)^n e^{s^2}\frac{d^n}{ds^n}\left(e^{-s^2}\right) \qquad (8.94)$$

(8.96) se escreve

$$e^{s^2} e^{-(w-s)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{w^n}{n!} H_n(s) \left\{ e^{s^2} e^{-(s-w)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-w)^n}{n!} \frac{d^n}{ds^n}\left[e^{-(s-w)^2}\right]_{w=0} \right.$$

exp. em série de Taylor

$$\Rightarrow \boxed{e^{-w^2+2sw} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{w^n}{n!}\left\{(-)^n e^{s^2}\frac{d^n}{ds^n}\left(e^{-s^2}\right)\right\}} \quad (8.95)$$

$H_n(s)$

QED

Função geratriz

$$F(s) \equiv e^{-s^2}$$

Taylor

$$F(s-w) = e^{-(s-w)^2} = F(s) - w\,F'(s) + \frac{w^2}{2!}F''(s) + \cdots$$

$$= e^{-s^2} - w\underbrace{\frac{d}{ds}(e^{-s^2})}_{-e^{-s^2}H_1(s)} + \frac{w^2}{2!}\underbrace{\frac{d^2}{ds^2}(e^{-s^2})}_{e^{-s^2}H_2(s)} + \cdots$$

$$= e^{-s^2}\left[H_0(s) + w\,H_1(s) + \frac{w^2}{2!}H_2(s) + \cdots\right]$$

$$\therefore \quad e^{s^2}e^{-(s-w)^2} = \underbrace{e^{-w^2+2sw}}_{\text{Função geratriz dos polins. de Hermite}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{w^n}{n!}H_n(s)$$

Função geratriz dos polins. de Hermite.

• que dá

$$H_n(s) = \left[\frac{d^n}{dw^n}\left(e^{-w^2+2ws}\right)\right]_{w=0}$$

Lembrando que $e^{-s^2} \to 0$ também para $s \to \pm\infty$, resulta que $H_n(s)$ tem 1 zero à esquerda dos de H_{n-1}, 1 à direita deles, e $(n-2)$ separando os de H_{n-1} (Total $= n$)

Verificar p/ $n = 0, 1, 2, 3$

8.8. Discussão das autofunções

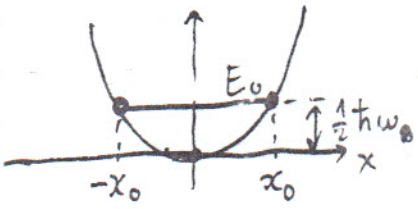
(a) Estado fundamental

P/ 1 oscilador clássico, vimos que a amplitude máx. de oscil. é (cf. (8.4))

$$x_M = \sqrt{\frac{2E}{k}} = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \qquad (8.96)$$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \longrightarrow x_M = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m\omega^2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = x_0$$

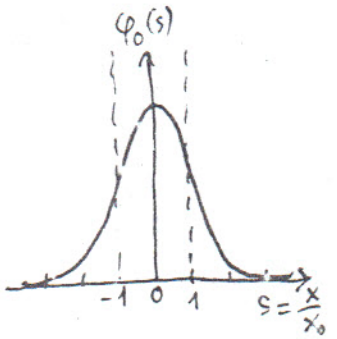
ou seja, $x_0 = sx$ é exatamente = à ampl. máx. clássica de oscil. de 1 oscil cl energia E_0

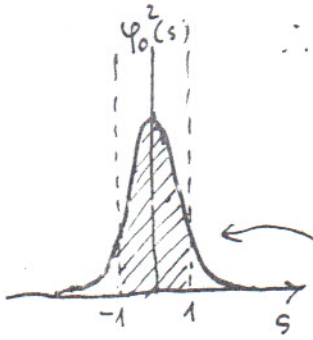


normalização em s ($\bar{n}$ em x)

$$\varphi_0(s) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{s^2}{2}} \quad \left\{ \varphi_0^2(s) = \frac{e^{-s^2}}{\sqrt{\pi}} \right. \qquad (8.97)$$

Gaussiana normalizada





∴ Os pts. -1 e 1 em s são os pts. de reversão clássicos, e a distrib. de probab. quântica está bastante concentrada entre eles.

$$\varphi_0^2(\pm 1) = \frac{e^{-1}}{\pi} \simeq 0{,}12$$

(b) Estados excitados

Como $H_n(s)$ é 1 polinômio de grau n em s, tem no máx. n raízes reais. Pelas (8.87), (8.94),

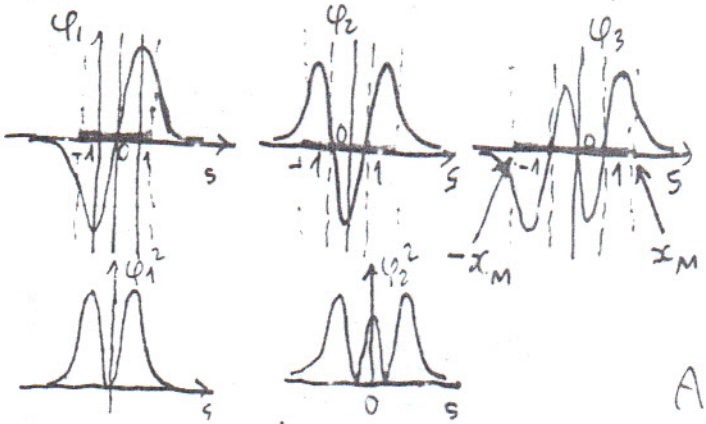
$H_1(s) = 2s \quad H_1(s) = 0$ p/ $s = 0$ (ímpar)

$H_2(s) = 4s^2 - 2 = 0$ p/ $s = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$ (2 zeros)

Pelo teorema de Rolle, entre cada 2 zeros de 1 função, ∃ pelo menos um zero de sua derivada. Logo, $H_3(s)$ tem pelo menos 3 zeros reais, H_4 pelo menos 4, ...; Mas, ao mesmo tpo., H_n tem no máx. n zeros reais. Logo, o nº é exatamente n.

$\varphi_n(s)$ tem n nós (zeros reais) (8.98)

o q concorda c/ a discussão qualitativa geral.



Pdor. de retorno clássicos p/

$$E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\boxed{(x_M)_n = \sqrt{\frac{2(n+\frac{1}{2})\hbar\omega}{m\omega^2}} = \sqrt{\frac{(2n+1)\hbar}{m\omega}} = \sqrt{(2n+1)}\,x_0} \qquad (8.99)$$

A amplitude máx. de oscil. clássica vai crescendo c/ $\sqrt{E_n}$, e a distrib. de probab. se concentra no intervalo $(-x_M, x_M)$

Classicamente, a probab. de encontrar (num instante ao acaso) a partíc. num intervalo dx da região de oscil. permitida pode ser tomada como proporcional ao tempo $dt = \frac{dx}{|v|}$ que a partícula passa nessa região (v = veloc.). Logo, como

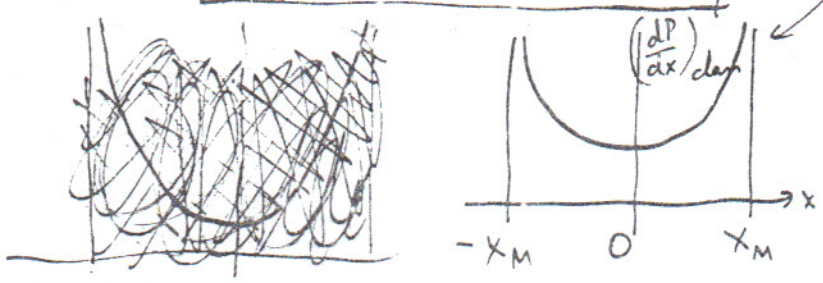
$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = E - V(x) = \underbrace{E}_{=\frac{1}{2}m\omega^2 x_m^2} - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2(x_M^2 - x^2)$$

$$\Rightarrow \boxed{|v| = \omega\sqrt{x_M^2 - x^2}} \qquad (8.100)$$

∴ Densidade de probab. clássica

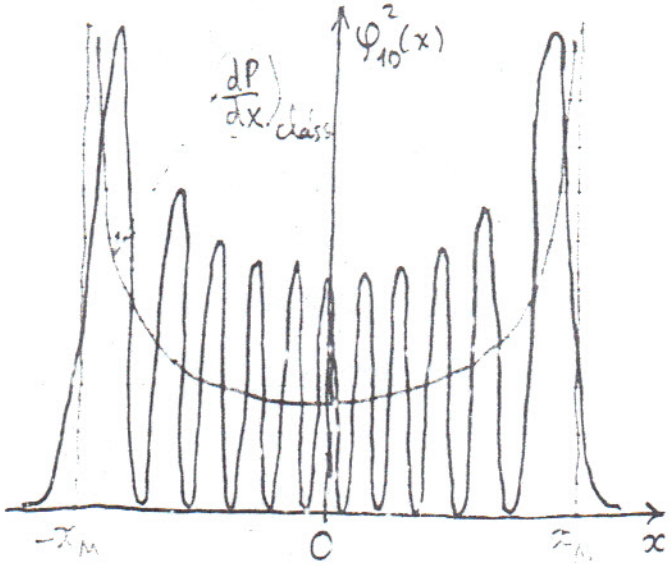
$$dP \propto \frac{dx}{|v|} \propto \frac{dx}{\sqrt{x_M^2 - x^2}} \qquad 1 = \int_{-x_M}^{x_M} \frac{dP}{dx}\,dx = C\int_{-x_M}^{x_M} \frac{dx}{\sqrt{x_M^2 - x^2}} = C\,\mathrm{sen}^{-1}\left(\frac{x}{x_M}\right)\Big|_{-x_M}^{x_M} = \pi C$$

$$\therefore \boxed{\left(\frac{dP}{dx}\right)_{\text{class}} = \frac{1}{\pi\sqrt{x_M^2 - x^2}}} \qquad (8.101)$$ dens. de prob. class.



→ ∞ nos pdos. de retorno pq. a partíc. para por ele e velor. = 0

Probab. mín. p/ $x = 0$, onde $|v|$ é máx.



P/ 1 estado alto de excitado, a distrib. de probab. quântica deve aproximar-se da clássica (princ. de correspond.). De q maneira? É preciso tomar a média sobre as oscilações quânticas, imperceptíveis p/ 1 detetor na escala clássica. A fig. mostra a corresp. class. x quânt. p/ $n = 10$.

8.9. Valores esperados e incertezas

Vamos calcular $\langle \hat{x} \rangle$, (Δx), $\langle \hat{p} \rangle$ e (Δp) no estado estacionário $|n\rangle$. P/ isso, é + fácil usar o método algébrico. Vimos (cf. (8.44)) que

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega \hat{x} + i\hat{p})$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega \hat{x} - i\hat{p})$$

$$\hat{a} + \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}\, m\omega \hat{x} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\, \hat{x}$$

$$\hat{a} - \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}\, i\hat{p}$$

$\therefore$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+) \quad (8.102) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^+)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^+ - \hat{a}) \quad (8.103) = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}\, x_0} (\hat{a}^+ - \hat{a}) \quad (8.104)$$

$$\left.\begin{aligned} \hat{a}\,|n\rangle &= \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ \hat{a}^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \end{aligned}\right\} \quad \langle n|\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^+|n\rangle = 0$$

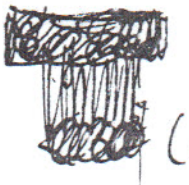
Logo,

$$\boxed{\langle \hat{x} \rangle_n = \langle n | \hat{x} | n \rangle = 0 \qquad \langle \hat{p} \rangle_n = \langle n | \hat{p} | n \rangle = 0} \quad (8.105)$$

o q/ se resulta imediatamente de ser $\varphi_n^2(x) = \varphi_n^2(-x)$

$\left(\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^2(x)\, x\, dx = 0, \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x) \underbrace{\frac{d\varphi_n}{dx}}_{\text{paridade oposta à de } \varphi_n} dx = 0 \right)$

a derivada de uma função $\begin{pmatrix} \text{par} \\ \text{ímpar} \end{pmatrix}$ é $\begin{pmatrix} \text{ímpar} \\ \text{par} \end{pmatrix}$.



Logo,

$$\boxed{(\Delta x)_n^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle_n \qquad (\Delta p)_n^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle_n} \quad (8.106)$$

$$\hat{x}^2 = \frac{1}{2} x_0^2 (2\hat{n} + \hat{1} + \hat{a}^2 + \hat{a}^{+2})$$

$$\hat{p}^2 = \frac{\hbar^2}{2x_0^2} (2\hat{n} + \hat{1} - \hat{a}^2 - \hat{a}^{+2})$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_n = \langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^+)^2 | n \rangle =$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \left\{ \underbrace{\langle n | \hat{a}^2 | n \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle n | \hat{a}^{+2} | n \rangle}_{=0} + \langle n | \underbrace{\hat{a}\hat{a}^+}_{=\hat{a}^+\hat{a}+\hat{1}} + \hat{a}^+\hat{a} | n \rangle \right\}$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\langle n | 2\hat{n} + \hat{1} | n \rangle \right) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{m\omega}$$

$$\therefore \quad \boxed{\langle \hat{x}^2 \rangle_n = (\Delta x)_n^2 = \underbrace{\left(n + \frac{1}{2}\right) x_0^2}_{= (x_M/\sqrt{2})^2 \text{ pela (8.99)}}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} \quad (8.107)$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle_n = -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle n | (\hat{a} - \hat{a}^+)^2 | n \rangle$$

$$= +\frac{m\hbar\omega}{2} \left(\langle n | \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} | n \rangle \right)$$

$$\boxed{(\Delta p)_n^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) m\hbar\omega} \quad (8.108)$$

$$(\Delta p \, \Delta x)_n = \sqrt{\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{m\omega}} \cdot \sqrt{\left(n + \frac{1}{2}\right) m\omega\hbar}$$

ou seja,

$$\boxed{(\Delta p\,\Delta x)_n = \left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar} \quad (8.108)$$

Em particular, no estado fundam.,

$$\boxed{\Delta p\,\Delta x = \tfrac{1}{2}\hbar} \quad (8.109)$$

ou seja, ele é 1 <u>estado de incerteza mínima</u> (gaussiana)

Temos ainda

$$\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle_n = \frac{1}{2}\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$\left\langle \tfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \right\rangle_n = \frac{1}{2}m\omega^2\cdot\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega} = \frac{1}{2}\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

ou seja,

$$\boxed{\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle_n = \underbrace{\left\langle \tfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \right\rangle_n}_{V(\hat{x})} = \frac{1}{2}\underbrace{\langle \hat{H} \rangle_n}_{=E_n}} \quad (8.110)$$

que é o análogo quântico da relação clássica (8.10): $\overline{T} = \overline{V} = \frac{1}{2}\overline{E} = \frac{1}{2}E$

Energia do ponto zero

16ª aula - 26-10-9

Quanticamente, o estado fundam. não pode ter energia 0 como no caso clássico devido ao princípio de incerteza: a partíc. não pode estar em repouso na origem. Se as incertezas de $\hat{x}$ e $\hat{p}$ são Δx e Δp, a partíc. tem no mínimo uma energia cinética

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{\left(\frac{1}{2}\hbar\right)^2}{2m(\Delta x)^2}$$

e uma energia potencial

$$\frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

de modo que sua energia total é pelo menos

$$\boxed{E(\Delta x) = \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}} \quad (8.112)$$

o que → os p/ $\Delta x \to 0$ e p/ $\Delta x \to \infty$, de modo que deve passar por um mínimo p/ 1 valor bem definido de $(\Delta x$

$$\frac{d}{d(\Delta x)} E = m\omega^2(\Delta x) - \frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^3} = 0 \quad p/$$

$= \frac{1}{2} x_0^2$ [conforme a (8.107)]

$$(\Delta x)^4 = \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2} \quad \left\{ \boxed{(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}} \Rightarrow \bar{E}(\Delta x) = \text{mínimo} \right. \qquad (8.113)$$

o que dá

$$\boxed{\left[\bar{E}(\Delta x)\right]_{mín} = \underbrace{\frac{1}{2} m\omega^2 \cdot \frac{\hbar}{2m\omega}}_{=\frac{1}{4}\hbar\omega} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{8m \cdot \frac{\hbar}{2m\omega}}}_{=\frac{1}{4}\hbar\omega} = \frac{1}{2}\hbar\omega} \qquad (8.114)$$

que é exatam.to a energia do estado fundamental do O.H.. Esta é ∴ a "energia de incerteza mínima", tb. chamada de energia de ponto zero do oscilador.

[15ª aula (01-10-91)]

8.10. Evolução temporal do pacote gaussiano

A sol. geral da eq. de Schröd. dependente do tpo, escrita na variável $s = x/x_0$, é

$$\boxed{\psi(s,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(s) e^{-iE_n t/\hbar}} \qquad (8.115)$$

onde

$$\boxed{\begin{aligned} \psi(s,0) = \psi_0(s) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(s) \\ \therefore \quad c_n &= (\varphi_n, \psi_0) \end{aligned}} \qquad (8.116)$$

↑ a normalização em s

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad \left\{ \frac{E_n}{\hbar} = n\omega + \frac{\omega}{2} \right.} \qquad (8.117)$$

Logo,

$$\boxed{\psi(s,t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(s) e^{-in\omega t}} \qquad (8.118)$$

Vamos tomar p/ $\psi_0(s)$ um pacote gaussiano idêntico ao estado fundamental (8.97), mas com seu

centro deslocado p/ 1 posição s_0:

$$\psi_0(s) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{1}{2}(s-s_0)^2} \quad (8.119)$$

P/ achar c_n, temos então que expandir (cf. (8.91))

$$\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{1}{2}(s-s_0)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(s) \quad (8.120)$$

onde

$$\varphi_n(s) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{1}{2}s^2} \cdot \frac{2^{-n/2}}{\sqrt{n!}} H_n(s)$$

ou seja,

$$e^{\frac{1}{2}s^2 - \frac{1}{2}(s-s_0)^2} = e^{ss_0 - \frac{1}{2}s_0^2} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot \frac{2^{-n/2}}{\sqrt{n!}} H_n(s) \quad (8.121)$$

Mas a (8.95), com $w = \frac{1}{2}s_0$, dá

$$e^{ss_0 - \frac{1}{4}s_0^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\frac{s_0}{2})^n}{n!} H_n(s)$$

$$\therefore e^{ss_0 - \frac{1}{2}s_0^2} = e^{-\frac{1}{4}s_0^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s_0^n}{2^n n!} H_n(s) \quad (8.122)$$

ou seja,

$$c_n = \frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}} s_0^n e^{-\frac{1}{4}s_0^2} \quad (8.123)$$

e

$$\psi_0(s) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}(s-s_0)^2} = e^{-\frac{1}{2}s^2} \cdot e^{ss_0 - \frac{1}{2}s_0^2}$$

$$\Rightarrow \psi_0(s) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}(s-s_0)^2} = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}(s^2 + 2\frac{1}{2}s_0^2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\frac{s_0}{2})^n}{n!} H_n(s) \quad (8.124)$$

Pela (8.118), então,

$$\psi(s,t) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-i\frac{\omega t}{2}} e^{-\frac{1}{2}(s^2 + \frac{s_0^2}{2})} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\frac{s_0}{2} e^{-i\omega t})^n}{n!} H_n(s) \quad (8.125)$$

160) Para um pacote Ψ, $\Psi(x,t) = \sum_n c_n \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$. Temos $|\psi(x,t)|^2 = \sum_{mn} c_m^* c_n \varphi_m^*(x)\varphi_n(x) e^{i\omega_{nm}t}$ com $\omega_{nm} = \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} = (n-m)\omega$ de modo que $|\psi(x,t)|^2$ é periódico de período $\frac{2\pi}{\omega}$, mas em geral muda de forma (~~[illegible]~~ o alastramento ocorre p/ 1 pacote livre)

A (8.124) se escreve

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{s_0}{2}\right)^n}{n!} H_n(s) = e^{\frac{1}{2}\left(s^2 + \frac{1}{2}s_0^2\right) - \frac{1}{2}(s-s_0)^2}$$

Logo,

$$\boxed{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{s_0}{2} e^{-i\omega t}\right)^n}{n!} H_n(s) = e^{\frac{1}{2}\left[s^2 + \frac{1}{2}(s_0 e^{-i\omega t})^2\right] - \frac{1}{2}(s - s_0 e^{-i\omega t})^2}} \quad (8.126)$$

e, levando na (8.125),

$$\psi(s,t) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-i\frac{\omega t}{2}} e^{-\frac{1}{2}\left(s^2 + \frac{1}{2}s_0^2\right)} \cdot e^{\frac{1}{2}\left[s^2 + \frac{1}{2}(s_0 e^{-i\omega t})^2\right] - \frac{1}{2}(s - s_0 e^{-i\omega t})^2}$$

$$\boxed{\psi(s,t) = \frac{e^{-i\frac{\omega t}{2}}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{4}s_0^2\left(1 - e^{-2i\omega t}\right) - \frac{1}{2}(s - s_0 e^{-i\omega t})^2}} \quad (8.127)$$

o que dá

$$\sqrt{\pi}\,|\psi(s,t)|^2 = \exp\left\{-\frac{1}{4}s_0^2\left(1 - e^{-2i\omega t} + 1 - e^{2i\omega t}\right) - \right.$$

$$\left. -\frac{1}{2}(s - s_0 e^{-i\omega t})^2 - \frac{1}{2}(s - s_0 e^{i\omega t})^2\right\}$$

$$= \exp\left\{-\frac{1}{2}s_0^2\left[1 - \cos(2\omega t)\right] - \frac{1}{2}\left(s^2 - 2ss_0 e^{-i\omega t} + s_0^2 e^{-2i\omega t} + s^2 - 2ss_0 e^{i\omega t} + s_0^2 e^{2i\omega t}\right)\right\}$$

$$= \exp\left\{-\frac{1}{2}s_0^2\left[1 - \cos(2\omega t)\right] - \frac{1}{2}\left(2s^2 - 4ss_0\cos(\omega t) + 2s_0^2\cos(2\omega t)\right)\right\}$$

$$= \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[2s^2 - 4ss_0\cos(\omega t) + s_0^2\underbrace{\left(1 + \cos 2\omega t\right)}_{2\cos^2(\omega t)}\right]\right\}$$

ou, finalmente,

$$\boxed{|\psi(s,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-(s - s_0\cos\omega t)^2\right]}$$

e sem se alastrar como no caso livre

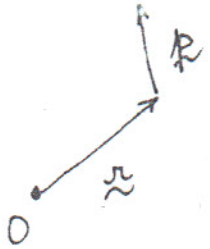
Logo, o pacote gaussiano c/ centro deslocado oscila como um todo, sem mudar de forma (∴ mantendo-se c/ incerteza mínima), c/ seu centro descrevendo o MHS clássico. Esta é 1 propr. única, importante p/ a teoria de estados coerentes

18ª aula - 18-5

9. MOMENTO ANGULAR

9.1. Mec. Clássica

Na mec. cláss., o momento $\measuredangle r$ de 1 partícula de momento linear $\underset{\sim}{p}$ em rel. a um pto. O, é



$$\boxed{\underset{\sim}{l} = \underset{\sim}{r} \times \underset{\sim}{p}} \quad (9.1)$$

onde $\underset{\sim}{r}$ = vetor de posição da partíc. em rel. a O. As componentes de $\underset{\sim}{l}$ são

$$\boxed{\begin{aligned} l_x &= y\,p_z - z\,p_y \\ l_y &= z\,p_x - x\,p_z \\ l_z &= x\,p_y - y\,p_x \end{aligned}} \quad (9.2)$$

Se a força q atua sobre a partíc. é 1 <u>força central</u> (dirigida p/ O),

$$\boxed{\underset{\sim}{F}(\underset{\sim}{r}) = -\nabla V(r) = -\frac{\partial V}{\partial r}\hat{r}} \quad (9.3)$$

← vetor unitário radial

temos

$$\boxed{\frac{d\underset{\sim}{l}}{dt} = \underbrace{\frac{d\underset{\sim}{r}}{dt}}_{\underset{\sim}{p}/m} \times \underset{\sim}{p} + \underset{\sim}{r} \times \frac{d\underset{\sim}{p}}{dt} = \underset{\sim}{r} \times \underset{\sim}{\vec{F}} = 0,} \quad (9.4)$$

ou seja, <u>o momento angular em rel. a O se conserva</u> (em módulo, direção e sentido).

Em partic., o mom. $\measuredangle r$ inicial é $\perp$ ao plano q contém $\underset{\sim}{r}_0$ e $\underset{\sim}{p}_0$ $(t=0)$ e a partícula se conserva sempre nesse plano (ex.: movto kepleriano)

Forças centrais são mto. importantes em MQ

Ex.: força coulombiana → átomo de hidrogênio e átomos hidrogenóides. Veremos depois q é possível decompor o movto sob a ação de forças centrais, escrito em coords. esféricas (r, θ, φ), em movto <u>angular</u> (θ, φ) e movto radial (r), e o " " está ligado c/

sandro33.alencar@hotmail.com

o momento angular, de modo q podemos estudar separadamente o operador momento angular quântico e suas autofunções, o q faremos agora.

9.2. Componentes de $\hat{\underset{\sim}{\ell}}$: regras de comutação

Os operadores quânticos de mom. ang. se definem de forma análoga ao caso clássico:

$$\hat{\underset{\sim}{\ell}} = \hat{\underset{\sim}{r}} \times \hat{\underset{\sim}{p}} \qquad (9.5)$$

Operador momento angular orbital de 1 partícula (veremos depois q há/outra forma de mom. ang. intrínseco, o spin, como p/ o fóton)

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_x &= \hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y \\ \hat{\ell}_y &= \hat{z}\,\hat{p}_x - \hat{x}\,\hat{p}_z \\ \hat{\ell}_z &= \hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x \end{aligned} \qquad (9.6)$$

← Notar que aqui não há ambiguidades de ordenamento. Pq o fator de cada produto comutam

$(\hat{y}\,\hat{p}_z)^\dagger = \hat{p}_z\,\hat{y} = \hat{y}\,\hat{p}_z$ pq $\hat{y}$ comuta c/ $\hat{p}_z$

Logo,

$$\hat{\ell}_x^\dagger = \hat{\ell}_x, \quad \hat{\ell}_y^\dagger = \hat{\ell}_y, \quad \hat{\ell}_z^\dagger = \hat{\ell}_z \qquad (9.7)$$

$[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_x] = \hat{y}\,\hat{p}_z\,\hat{p}_x - \hat{p}_x\,\hat{y}\,\hat{p}_z$
$- \hat{y}\,\hat{p}_x\,\hat{p}_z + \hat{y}\,\hat{p}_x\,\hat{p}_z$
$= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{p}_x] + [\hat{p}_x, \hat{y}]\,\hat{p}_z$ (=0)

ou seja, $\hat{\underset{\sim}{\ell}} = \hat{\underset{\sim}{\ell}}^\dagger$ é um operador hermitiano.

Vamos calcular as regras de comutação entre as componentes de $\hat{\underset{\sim}{\ell}}$.

$$[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] = [\hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y,\ \hat{z}\,\hat{p}_x - \hat{x}\,\hat{p}_z] \qquad (9.8)$$

$[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] = 0$ — $[\hat{y}\hat{p}_z + \hat{x}]\hat{p}_z \pm \hat{x}[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_z]$ →

$[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] = 0$ — $(\hat{y}\hat{p}_z\hat{x} - \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z)\hat{p}_z \pm \hat{x}(\hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z)$
$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_z + \hat{x}\hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z$

$$\rightarrow [\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y] = [\hat{y}\,\hat{p}_z, \hat{z}\,\hat{p}_x] + [\hat{z}\,\hat{p}_y, \hat{x}\,\hat{p}_z]$$

$$= \hat{z}\,[\hat{y}\,\hat{p}_z, \hat{p}_x] + [\hat{y}\,\hat{p}_z, \hat{z}]\,\hat{p}_x$$ ($[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0$)

$$+ \hat{x}\,[\hat{z}\,\hat{p}_y, \hat{p}_z] + [\hat{z}\,\hat{p}_y, \hat{x}]\,\hat{p}_z = \hat{y}\,[\hat{p}_z, \hat{z}]\,\hat{p}_x + \hat{x}\,[\hat{z}, \hat{p}_z]\,\hat{p}_y$$ ($[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}] = 0$; $[\hat{p}_z, \hat{z}] = -i\hbar$; $[\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$)

$$= i\hbar\,(\hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x) = i\hbar\,\hat{\ell}_z$$

$[\hat{y}\hat{p}_y, \hat{p}_z] = \hat{y}[\hat{p}_y, \hat{p}_z]$

$+ [\hat{p}_z, \hat{y}]\hat{p}_y$

labirintodocoelhoartista.com
blog

A definição de operadores de mom. Ang. pelas regras de comutação é + geral do que a do mom. Ang. orbital, como veremos depois: vale tb. p/ o spin.

ou seja,

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_z \quad (9.9)$$

Analogam^te (verifique!) os outros 2 comutadores se obtêm por permut. circular $x \to y \to z \to x$:

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hbar \hat{l}_x \quad (9.10)$$
$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar \hat{l}_y$$

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$$

Forma compacta (simbólica)

$$\hat{\underset{\sim}{l}} \times \hat{\underset{\sim}{l}} = i\hbar \hat{\underset{\sim}{l}}$$

A magnitude do mom. Ang. está relacionada c/ o operador

$$\hat{l}^2 \equiv \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \quad (9.11)$$

ou $[\hat{l}_j, \hat{l}_k] = i\hbar \epsilon_{jkm} \hat{l}_m$ (convenção de soma)

Vamos ver suas regras de comut. c/ as componentes:

$$[\hat{l}_x, \hat{l}^2] = [\hat{l}_x, \hat{l}_y^2] + [\hat{l}_x, \hat{l}_z^2] = \hat{l}_y \underbrace{[\hat{l}_x, \hat{l}_y]}_{i\hbar \hat{l}_z} + \underbrace{[\hat{l}_x, \hat{l}_y]}_{i\hbar \hat{l}_z} \hat{l}_y$$

$$+ \hat{l}_z \underbrace{[\hat{l}_x, \hat{l}_z]}_{-i\hbar \hat{l}_y} + \underbrace{[\hat{l}_x, \hat{l}_z]}_{-i\hbar \hat{l}_y} \hat{l}_z = i\hbar \hat{l}_y \hat{l}_z + i\hbar \hat{l}_z \hat{l}_y - i\hbar \hat{l}_z \hat{l}_y - i\hbar \hat{l}_y \hat{l}_z = 0$$

e analogam^te p/ as outras...

$$[\hat{l}_x, \hat{l}^2] = [\hat{l}_y, \hat{l}^2] = [\hat{l}_z, \hat{l}^2] = 0 \quad (9.13)$$

(compatibilidade)

ou seja, $\hat{l}^2$ comuta c/ as 3 componentes de $\hat{\underset{\sim}{l}}$.

Como cada componente não comuta c/ as 2 outras, poderemos encontrar autofunções simultâneas de $\hat{l}^2$ e de uma só das componentes: convenciona-se escolher $\hat{l}_z$. O problema é então de obter as autofunções simultâneas de $\hat{l}^2$ e $\hat{l}_z$.

Vamos resolver este probl. por um método algébrico, análogo ao que foi empregado p/ o O.H.

9.3. Os operadores $\hat{l}_+$ e $\hat{l}_-$

Vamos começar definindo operadores análogos

$\hat{x}[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{p}_z]$

$= \hat{x}\hat{z}\underbrace{[\hat{p}_y, \hat{p}_z]}_{=0} + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y$

a $\hat{a}^\dagger$ e $\hat{a}$:

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{\ell}_+ &= \hat{\ell}_x + i\hat{\ell}_y \\ \hat{\ell}_- &= \hat{\ell}_x - i\hat{\ell}_y = (\hat{\ell}_+)^\dagger\end{aligned}} \qquad (9.14)$$

Temos

$$[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_\pm] = \underbrace{[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_x]}_{i\hbar\hat{\ell}_y} \pm i\underbrace{[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_y]}_{-i\hbar\hat{\ell}_x} = i\hbar(\hat{\ell}_y \mp i\hat{\ell}_x)$$
$$= \pm\hbar(\hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y) = \pm\hbar\hat{\ell}_\pm$$

ou seja,

$$\boxed{\begin{aligned}[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_+] &= \hbar\hat{\ell}_+ \\ [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_-] &= -\hbar\hat{\ell}_-\end{aligned}} \qquad (9.15)$$

$$\hat{\ell}_+\hat{\ell}_- = \hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2 + \hbar\hat{\ell}_z$$

Por outro lado,

$$\hat{\ell}_+\hat{\ell}_- = (\hat{\ell}_x + i\hat{\ell}_y)(\hat{\ell}_x - i\hat{\ell}_y) = \underbrace{\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2}_{\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2} - i\underbrace{[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y]}_{i\hbar\hat{\ell}_z}$$

$$\boxed{\hat{\ell}_+\hat{\ell}_- = \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hbar\hat{\ell}_z} \qquad (9.16)$$

$$\hat{\ell}_-\hat{\ell}_+ = (\hat{\ell}_x - i\hat{\ell}_y)(\hat{\ell}_x + i\hat{\ell}_y) = \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + i\underbrace{[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y]}_{i\hbar\hat{\ell}_z}$$

$$\boxed{\hat{\ell}_-\hat{\ell}_+ = \underbrace{\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2}_{= \hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2} - \hbar\hat{\ell}_z} \qquad (9.17)$$

Combinando as (9.16) e (9.17), obtemos as 2 rels.:

$$\boxed{[\hat{\ell}_+, \hat{\ell}_-] = 2\hbar\hat{\ell}_z} \qquad (9.18)$$

e $\hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+ = 2(\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2)$, ou seja,

$$\boxed{\hat{\ell}^2 = \frac{1}{2}(\hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+) + \hat{\ell}_z^2} \qquad (9.19)$$

Finalmente, pelas (9.13),

$$\boxed{[\hat{\ell}_+, \hat{\ell}^2] = [\hat{\ell}_-, \hat{\ell}^2] = [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}^2] = 0} \quad (9.20)$$

As (9.15), (9.18) e (9.20) são equivalentes às regras de comut. anteriores

9.4. Os autovalores de $\hat{\ell}^2$ e $\hat{\ell}_z$

Vamos procurar autofunções simultâneas de $\hat{\ell}^2$ e $\hat{\ell}_z$ cf autovalores q vamos designar por $\lambda\hbar^2$ e $m\hbar$ (Já vimos exs da quantiz. de mom. ang. em unids. $\hbar$; $[\text{mom. ang.}] = [\hbar]$ ∴ λ, m adimensionais)

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\ell}^2 |\lambda, m\rangle &= \lambda\hbar^2 |\lambda, m\rangle \\ \hat{\ell}_z |\lambda, m\rangle &= m\hbar |\lambda, m\rangle \end{aligned}} \quad (9.21)$$

Sabemos que, se $\hat{A}$ é um operador ∀ e $|\psi\rangle$ um vector do estado

$$\boxed{\| \hat{A}|\psi\rangle \|^2 = \langle \psi | \hat{A}^+ \hat{A} | \psi \rangle \geq 0} \quad (9.22)$$

Em particular, se $\hat{A}$ é Hermiteano,

$$\boxed{\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle_\psi \geq 0} \quad (9.23)$$

e, se $|\psi\rangle = |\alpha\rangle$ é 1 autovector de $\hat{A}^2$ cf autovalor α,

$$\boxed{\hat{A}^2 |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle; \quad \hat{A} = \hat{A}^+ \Rightarrow \langle \alpha | \hat{A}^2 | \alpha \rangle = \alpha^2 \geq 0} \quad (9.24)$$

ou seja, os autovalores do quadrado de um operador hermiteano são ≥ 0.

Por (9.21), isto $\Rightarrow$

$$\boxed{\lambda \geq 0} \quad (9.22)$$

$\langle \lambda,m|\hat{\ell}^2|\lambda,m\rangle = \langle \lambda,m|\hat{\ell}_x^2|\lambda,m\rangle + \langle \lambda,m|\hat{\ell}_y^2|\lambda,m\rangle + \langle \lambda,m|\hat{\ell}_z^2|\lambda,m\rangle$ (≥ 0, ≥ 0, ≥ 0)

(9.23) $\left\{ \begin{aligned} \langle \ell,m|\hat{\ell}_x^2|\ell,m\rangle \geq 0 \\ \langle \ell,m|\hat{\ell}_y^2|\ell,m\rangle \geq 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \langle \ell,m|\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2|\ell,m\rangle = \hbar^2(\lambda - m^2) \geq 0$

Além disso,

$$\boxed{(\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2)|\lambda,m\rangle = (\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2)|\lambda,m\rangle = \hbar^2(\lambda - m^2)|\lambda,m\rangle}$$

ou seja, $|\lambda,m\rangle$ é 1 autovector de $\hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2$ cf autovalor $(\lambda - m^2)\hbar^2$ (9.23)

Logo,

$$\boxed{\lambda \geq m^2} \quad (9.23)$$

Pelas (9.20),

$$0 = [\hat{\ell}_\pm, \hat{\ell}^2]|\lambda,m\rangle = \hat{\ell}_\pm \underbrace{\hat{\ell}^2|\lambda,m\rangle}_{\lambda\hbar^2|\lambda,m\rangle} - \hat{\ell}^2 \hat{\ell}_\pm |\lambda,m\rangle$$

$$\therefore \boxed{\hat{\ell}^2(\hat{\ell}_\pm|\lambda,m\rangle) = \lambda\hbar^2(\hat{\ell}_\pm|\lambda,m\rangle)} \quad (9.24)$$

autovetor c/ o mesmo λ

Por outro lado, as (9.15) dão

$$[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_\pm]|\lambda,m\rangle = \hat{\ell}_z(\hat{\ell}_\pm|\lambda,m\rangle) - \hat{\ell}_\pm(\underbrace{\hat{\ell}_z|\lambda,m\rangle}_{m\hbar|\lambda,m\rangle})$$

$$= \pm\hbar(\hat{\ell}_\pm|\lambda,m\rangle)$$

$$\therefore \boxed{\hat{\ell}_z(\hat{\ell}_\pm|\lambda,m\rangle) = (m\pm1)\hbar(\hat{\ell}_\pm|\lambda,m\rangle)} \quad (9.25)$$

As (9.24) e (9.25) mostram que

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{\ell}_-|\lambda,m\rangle &= c_{\lambda m}|\lambda,m-1\rangle \\ \hat{\ell}_+|\lambda,m\rangle &= d_{\lambda m}|\lambda,m+1\rangle\end{aligned}} \quad (9.26)$$

{ operador de abaixa^{to}

{ oper. de levanta^{to}

17ª aula - 25-10-

onde $c_{\lambda m}$ e $d_{\lambda m}$ podem, em particular, ser $= 0$.

Logo, enquanto c e d forem $\neq 0$, os operadores $\hat{\ell}_-$ e $\hat{\ell}_+$ respectiva^{te} abaixam e levantam o autovalor m de uma unidade, sem alterar o valor do λ. Mas, pela (9.23), p/ λ fixo,

$$\boxed{m^2 \leq \lambda \quad \{ \quad -\sqrt{\lambda} \leq m \leq \sqrt{\lambda}} \quad (9.27)$$

Logo, m não pode ser nem aumentado nem diminuido indefinida^{te}. A única forma de evitar isto é que existam um valor mínimo m_1 e um valor máximo m_2 de m, p/ um dado λ, tais que

$$\boxed{m_2 \geq m_1} \qquad \boxed{\begin{aligned}\hat{\ell}_-|\lambda,m_1\rangle &= 0 \\ \hat{\ell}_+|\lambda,m_2\rangle &= 0\end{aligned}} \quad (9.28)$$

$\langle\lambda,m_1|\lambda,m_1\rangle = 1$

$\langle\lambda,m_2|\lambda,m_2\rangle = 1$

Além disto, como podemos passar de m_1 a m_2 por aplics. de $\hat{l}_+$, $m_2 - m_1 =$ inteiro ≥ 0 (9.28a)

$$\hat{l}_+ \hat{l}_- = (\hat{l}_x + i\hat{l}_y)(\hat{l}_x - i\hat{l}_y) = \underbrace{\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2}_{\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2} - i\underbrace{(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x)}_{i\hbar\hat{l}_z}$$

(9.16) $\Rightarrow$
$$\boxed{\hat{l}_+ \hat{l}_- = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 + \hbar\hat{l}_z} \quad (9.29)$$

$$\hat{l}_- \hat{l}_+ = (\hat{l}_x - i\hat{l}_y)(\hat{l}_x + i\hat{l}_y) = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + i\underbrace{(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x)}_{i\hbar\hat{l}_z}$$

(9.17) $\Rightarrow$
$$\boxed{\hat{l}_- \hat{l}_+ = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hbar\hat{l}_z} \quad (9.30)$$

Cf. (9.16), (9.17)

Aplicando $\hat{l}_+$ à 1ª (9.28), vem

$$\hat{l}_+ \hat{l}_- |\lambda, m_1\rangle = 0 = \underbrace{\hat{l}^2|\lambda, m_1\rangle}_{\hbar^2\lambda|\lambda,m_1\rangle} - \underbrace{\hat{l}_z^2|\lambda, m_1\rangle}_{\hbar^2 m_1^2|\lambda,m_1\rangle} + \underbrace{\hbar\hat{l}_z|\lambda, m_1\rangle}_{\hbar^2 m_1|\lambda,m_1\rangle}$$

$$= \hbar^2\left(\lambda - m_1^2 + m_1\right)|\lambda, m_1\rangle = 0 \quad (9.31)$$

Como $|\lambda, m_1\rangle \neq 0$, isto $\Rightarrow$

$$\boxed{\lambda = m_1(m_1 - 1)} \quad (9.32)$$

Analogamente, aplicando $\hat{l}_-$ à 2ª (9.28), vem

$$\hat{l}_- \hat{l}_+ |\lambda, m_2\rangle = \hat{l}^2|\lambda, m_2\rangle - \hat{l}_z^2|\lambda, m_2\rangle - \hbar\hat{l}_z|\lambda, m_2\rangle$$

$$= \hbar^2(\lambda - m_2^2 - m_2)|\lambda, m_2\rangle = 0 \quad (9.33)$$

o q dá

$$\boxed{\lambda = m_2(m_2 + 1)} \quad (9.34)$$

As (9.32) e (9.34) dão

$$m_1^2 - m_1 = m_2^2 + m_2 \quad \left\{ \underbrace{m_1^2 - m_2^2}_{(m_1+m_2)(m_1-m_2)} = m_1 + m_2 \right.$$

$$\boxed{(m_1 + m_2)(1 + m_2 - m_1) = 0} \quad (9.35)$$

Mas $m_2 \geq m_1$ pela (9.28).

Logo, a (9.35) $\Rightarrow$

$$\boxed{m_1 = -m_2} \quad (9.36)$$

Logo, pela (9.28a),

$$\boxed{m_2 - m_1 = 2m_2 = \text{inteiro} \overset{\geq 0}{\equiv} 2j} \quad (9.38)$$

onde definimos o inteiro como sendo $2j$, ou seja, os valores possíveis de j seriam inteiros e semi-inteiros

$$\boxed{j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \tfrac{5}{2}, 3, \ldots} \quad (9.39)$$

~~Veremos e tendo que [illegible]~~ Para um dado j, os valores possíveis de m são

$$\boxed{m = \underset{\substack{\uparrow \\ m_1}}{-j}, -j+1, \ldots, j-1, \underset{\substack{\uparrow \\ m_2}}{j}} \quad (9.40)$$

e devemos ter

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\ell}_- |j, -j\rangle &= 0 \\ \hat{\ell}_+ |j, j\rangle &= 0 \end{aligned}} \quad (9.40a) \quad (\text{cf. } (9.28))$$

Note que $m_2 < \sqrt{\lambda}$, $-\sqrt{\lambda} < m_1$

e a (9.34) dá

$$\lambda = j(j+1) \quad \left\{ \boxed{\lambda_j = \sqrt{j(j+1)}} \right. \quad (9.41)$$

$(9.22)\ \lambda \geq 0$

de modo que, substituindo λ por j, as (9.21) ficam

$$\boxed{\begin{aligned} &\hat{\ell}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 \sqrt{j(j+1)}\, |j, m\rangle \\ &\hat{\ell}_z |j, m\rangle = m\hbar\, |j, m\rangle \\ &j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \ldots \ ; \quad m = -j, \ldots, j \end{aligned}} \quad (9.42)$$

Podemos agora calcular c e d nas (9.26). Como os vetores são supostos normalizados,

$$\| \hat{\ell}_- |\lambda, m\rangle \|^2 = \langle \lambda, m | \hat{\ell}_+ \hat{\ell}_- | \lambda, m\rangle = |c_{\lambda, m}|^2$$

$$= \hbar^2 (\lambda - m^2 + m) = \hbar^2 \overbrace{[j(j+1) - m(m-1)]}^{= j^2 - m^2 + j + m}$$

cf. (9.31)

o que, escolhendo convenientemente a fase, permite tomar

$$c_{\lambda,m} = c_{j,m} = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m-1)} = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \quad (9.43)$$

Aplicando $\hat{\ell}_-$ a ambos os membros da (9.26), e usando a (9.33),

$$\hat{\ell}_-\hat{\ell}_+|\lambda,m\rangle = \hbar^2(\lambda^2-m^2-m)|\lambda,m\rangle =$$

$$= d_{\lambda,m}\hat{\ell}_-|\lambda,m+1\rangle = d_{\lambda,m}\,c_{\lambda,m+1}|\lambda,m\rangle$$

ou seja,

$$d_{\lambda,m} = \frac{\hbar^2(\lambda^2-m^2-m)}{c_{\lambda,m+1}} = \frac{\hbar^2(\lambda^2-m^2-m)}{\hbar\sqrt{\lambda^2-\underbrace{(m+1)^2+m+1}_{-m^2-m}}} = \hbar\sqrt{\underbrace{\lambda^2-m^2-m}_{j^2+j}}$$

$$\therefore \quad d_{j,m} = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m+1)} = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \quad (9.44)$$

$$= c_{j,m+1}$$

Finalmente, ← Importante

$$\hat{\ell}_-|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\;|j,m-1\rangle$$

$$\hat{\ell}_+|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\;|j,m+1\rangle \quad (9.45)$$

Os resultados obtidos, como no caso do oscilador harmônico, basearam-se exclusivamente nas regras de comutação (9.9) – (9.11). Vamos ver agora, usando p/ a definição (9.6) do mom. ang. orbital, que os autovalores neste caso só podem ser inteiros:

$$j \to \ell = 0, 1, 2, \ldots \quad (\text{p/ mom. ang. orbital}) \quad (9.46)$$

Entretanto, as regras de comut. são + gerais, aplicando-se p/ ao momento angular intrínseco, como o spin do fóton. Veremos + tarde q p/ o momento ang. intrínseco valores semi-inteiros são permitidos (P/ ex.) p/ o elétron, $j = \frac{1}{2}$. A vantagem do tratado algébrico é q todos os resultados deduzidos das regras de comut. permanecem válidos neste caso.

16ª aula – 03-10-91 | 17ª aula – 08-

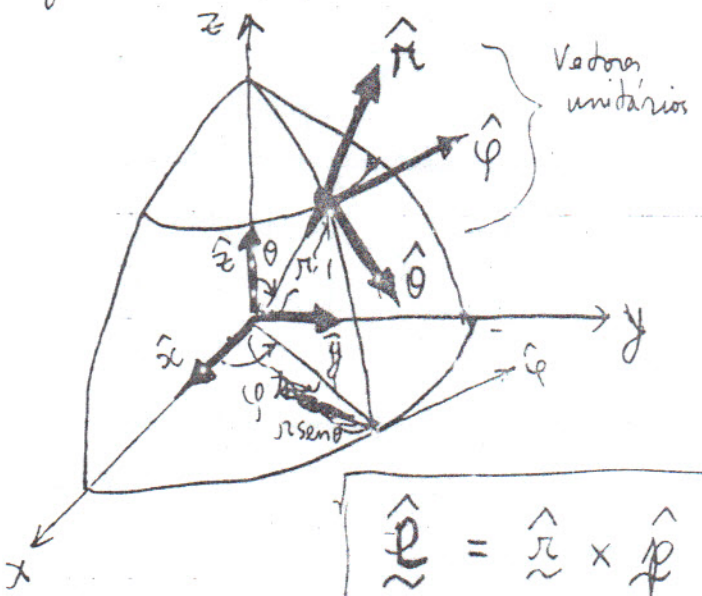
9.5. As componentes de $\hat{\vec{L}}$ em coords. esféricas

P/ 1 partícula num potencial central $V(r)$, é natural usar coords. esféricas, tomando $\psi(\vec{r},t) = \psi(r,\theta,\varphi,t)$. Veremos + tarde q $\exists$ m sols. estacionárias em que a dependência de $\vec{r}$ se separa da de (θ,φ):

$$\psi_E(r,\theta,\varphi,t) = R(r)\,S(\theta,\varphi)\,e^{-iEt/\hbar} \qquad (9.46)$$

$(0 \le \theta \le \pi)$ $(0 \le \varphi < 2\pi)$

e q as funções $S(\theta,\varphi)$ são precisa de autofunções do momento angular. P/ obter a expressão dessas autofunções, é conveniente exprimir $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ em termos das coords. esféricas angulares (θ,φ).



Deslocação ∞ mais: (dr, $r\,d\theta$, $r\,\mathrm{sen}\theta\,d\varphi$)

$$\vec{\nabla} = \hat{r}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\cdot\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{\varphi}\cdot\frac{1}{r\,\mathrm{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad (9.47)$$

$$\hat{\vec{L}} = \vec{r}\times\hat{\vec{p}} = -i\hbar\,\vec{r}\times\vec{\nabla}. \qquad (9.48)$$

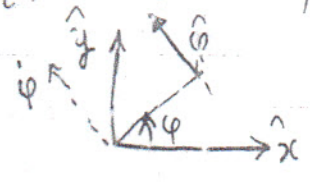
($\vec{r} = r\hat{r}$)

$\hat{r}\times\hat{\theta} = \hat{\varphi}$ $\quad \hat{r}\times\hat{\varphi} = -\hat{\theta}$

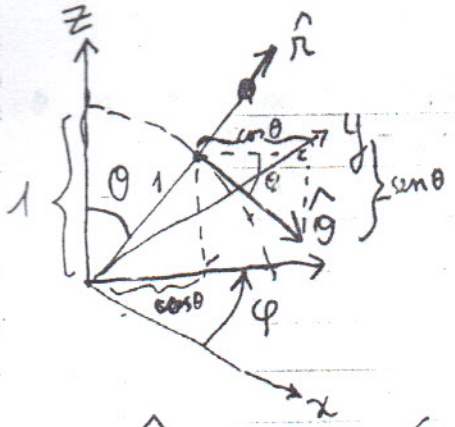
$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar\,r\left[\hat{\varphi}\cdot\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\cdot\frac{1}{r\,\mathrm{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar\left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\cdot\frac{1}{\mathrm{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (9.49)$$

P/ obter $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$, temos de projetar $\hat{\vec{L}}$ sobre as direções $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$. Temos



$$\hat{\varphi}\cdot\hat{x} = -\mathrm{sen}\varphi \qquad \hat{\varphi}\cdot\hat{z} = 0$$
$$\hat{\varphi}\cdot\hat{y} = \cos\varphi \qquad (9.50)$$



$$\hat{x}\cdot\hat{\theta} = \cos\theta\cos\varphi$$
$$\hat{\theta}\cdot\hat{y} = \cos\theta\,\mathrm{sen}\varphi$$
$$\hat{\theta}\cdot\hat{z} = -\mathrm{sen}\theta \qquad (9.51)$$

Logo,

$$\hat{\ell}_x = -i\hbar\left(-\mathrm{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta\cos\varphi}{\mathrm{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{\ell}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta\,\mathrm{sen}\varphi}{\mathrm{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{\ell}_z = +i\hbar\cdot\frac{1}{\mathrm{sen}\theta}(-\mathrm{sen}\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

ou seja,

$$\hat{\ell}_x = i\hbar\left(\mathrm{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{cotg}\,\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{\ell}_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{cotg}\,\theta\,\mathrm{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (9.52)$$
$$\hat{\ell}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{\ell}_+ = \hat{\ell}_x + i\hat{\ell}_y = i\hbar\left[\underbrace{(\mathrm{sen}\varphi - i\cos\varphi)}_{-i(\cos\varphi+i\mathrm{sen}\varphi)}\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{cotg}\,\theta\,(\cos\varphi+i\mathrm{sen}\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

$$\hat{\ell}_- = \hat{\ell}_x - i\hat{\ell}_y = i\hbar\left[\underbrace{(\mathrm{sen}\varphi + i\cos\varphi)}_{i(\cos\varphi-i\mathrm{sen}\varphi)}\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{cotg}\,\theta\,(\cos\varphi-i\mathrm{sen}\varphi)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

$$\hat{\ell}_+ = \hbar\, e^{i\varphi}\left(i\,\mathrm{cotg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$
$$\hat{\ell}_- = \hbar\, e^{-i\varphi}\left(i\,\mathrm{cotg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\partial}{\partial\theta}\right) \qquad (9.53)$$

Probl. 39. Usando a relação $\hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hbar\hat{\ell}_z$, mostre que

$$\hat{\ell}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\mathrm{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\mathrm{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \qquad (9.54)$$

9.6. As autofunções de $\hat{l}_z$

$$\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad (9.55).$$

Logo, as autofs. só dependem de φ:

$$\hat{l}_z F_m(\varphi) = m\hbar F_m(\varphi) \qquad |m| = \text{inteiro ou semi-int.} \qquad (9.56)$$

$$\therefore \quad -i\hbar\frac{dF_m}{d\varphi} = \hbar m F_m(\varphi) \quad \left\{ \quad \frac{dF_m}{d\varphi} = im F_m(\varphi) \right.$$

e q dá

$$F_m(\varphi) = N_m e^{im\varphi} \quad (0 \le \varphi \le 2\pi) \qquad (9.57)$$

onde N_m = fator de normaliz.

$$\therefore \quad F_m(\varphi + 2\pi) = \pm F_m(\varphi) \quad \Big| \begin{array}{l} + \text{ p/ } m \text{ inteiro} \\ - \text{ " } m \text{ semi-inteiro} \end{array} \qquad (9.58)$$

Como $\varphi + 2\pi$ é o mmo. $\not\in$ q φ, poderia parecer 1º que isso exclui m semi-inteiro: a função de onda $\bar{n}$ seria uniforme. Mas é preciso lembrar que a "$\bar{n}$ tem interpret. física direta; somente o seu módulo ao quadrado é interpretável como dens. de probab. – e tem de ser uniforme. Isto $\bar{n}$ exclui um fator de fase arbitr., e é compatível cl a (9.58).

Conforme veremos logo, porém, os valores semi-inteiros serão excluídos pela (9.40) + o fato de que j $\bar{n}$ pode ser semi-inteiro pl mom. $\not\in$ orbital. Antecipando este resultado, podemos normalizar as (9.57):

j inteiro $\Rightarrow$ m inteiro (9.59)

$$\int_0^{2\pi} |F_m(\varphi)|^2 d\varphi = |N_m|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi |N_m|^2 = 1$$

Podemos tomar

$$N_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \qquad (9.60)$$

θ q dá' as autofunções normalizadas

$$F_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (m = 0, \pm 1, \ldots, \pm j) \qquad (9.61)$$

Note q são idênticas às q já' vimos p/ a partíc. sobre 1 círculo (cf. (5.72)).

Sabemos q formam 1 base ortonormal completa em φ; em particular,

(↑ série de Fourier)

$$(F_m, F_n) = \int_0^{2\pi} F_m^* F_n \, d\varphi = \delta_{mn} \qquad (9.62)$$

20ª aula - 28-5

9.7. Os autoestados $|j, \pm j\rangle$

Pelas (9.40a) ou (9.45), devemos ter

$$\hat{\ell}_- |j, -j\rangle = 0 \qquad \hat{\ell}_+ |j, j\rangle = 0 \qquad (9.63)$$

onde $\hat{\ell}_\pm$ é' dado pela (9.53) e

$$|j, \pm j\rangle \longrightarrow S_{j,\pm j}(\theta, \varphi) = T_{j,\pm j}(\theta) \frac{e^{\pm ij\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (9.64)$$

Substituindo nas (9.53), vemos que, sendo $\frac{\partial}{\partial\varphi} S_{j,\pm j} = \pm ij S_{j,\pm j}$ temos

$$\hat{\ell}_\pm S_{j,\pm j} = \pm \hbar \frac{e^{\pm i(j \pm 1)\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} - j \operatorname{cotg}\theta \right) T_{j,\pm j}(\theta) \qquad (9.6$$

de modo q a eq. em θ é' a mesma p/ ± j (podemos omitir este índice):

$$\left(\frac{d}{d\theta} - j \operatorname{cotg}\theta \right) T_j(\theta) = 0 \qquad (9.66)$$

$$\frac{dT_j}{d\theta} = j \operatorname{cotg}\theta \, T_j \qquad \left\{ \frac{dT_j}{T_j} = j \frac{\cos\theta \, d\theta}{\operatorname{sen}\theta} = j \frac{d(\operatorname{sen}\theta)}{\operatorname{sen}\theta} \right.$$

$\therefore$

$$\ln T_j(\theta) = j \ln \operatorname{sen}\theta + \text{const.}$$

$$\rightarrow \boxed{T_j(\theta) = \underbrace{N_j}_{\text{Fator de normaliz.}} (\operatorname{sen}\theta)^j} \quad (9.67)$$

P/ ver se autovalores semi-inteiros são permitidos, consideremos o caso + baixo deles, $j = \frac{1}{2}$. Neste caso, teríamos 2 autofunções

$$\langle \theta, \varphi | \tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2} \rangle \rightarrow \boxed{S_{\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) = N_{\pm} (\operatorname{sen}\theta)^{1/2} e^{\pm i\frac{\varphi}{2}}} \quad (9.68)$$

q são regulares p/ $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$ (às vezes se diz q autovalores semi-ints são excluídos pq as autofs são singulares; a (9.68) mostra q isto não é verdade), e mudam de sinal p/ $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$, o q, como vimos, não é tão pouco rejeitado p/ excluí-las.

[Consideremos, porém, a dens. de corrente de probab.:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \underset{\sim}{\nabla} \psi - \psi \underset{\sim}{\nabla} \psi^*\right) \quad (9.69)$$

p/ um ψ da forma (9.46). Pela (9.47),

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left\{ \hat{r}\left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial r} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\theta}}{r}\left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial\theta}\right) + \frac{\hat{\varphi}}{r\operatorname{sen}\theta}\left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial\varphi}\right)\right\} \quad (9.70)$$

Omitindo a dependência de r e φ, teremos

$$j_\varphi \propto \frac{|R(r)|^2}{r\operatorname{sen}\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\right)^2 \left\{ \underbrace{e^{\mp i\frac{\varphi}{2}}(\mp i)e^{\pm i\frac{\varphi}{2}} - e^{\pm i\frac{\varphi}{2}}(\mp i)e^{\mp i\frac{\varphi}{2}}}_{= \pm 2i} \right.$$

ou seja,

$$\boxed{j_\varphi \propto \frac{|R(r)|^2}{r}} \quad (9.71)$$

$R_2(r) = \frac{u_2(r)}{r}$

$u_2(r) = O(r^{2+1})$

$R_2(r) = O(r^0)$

que é singular p/ $r \rightarrow 0$,

ou seja, ao longo de todo o eixo z, cuja orientação, num problema de simetria esférica, deveria ser arbitrária; temos aqui, ao contrário, 1 espécie de "singularidade" de vórtice" de fluxo de probab., q violaria

p/ normalizabilidade, basta que $\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr < \infty$.

p/ 1 partíc. livre, p/ ex., isso define o comport. de $R(r)$ p/ $r \rightarrow 0$ (pela eq. ≠ al.)

"Autofunções" de $\hat{\vec{l}}^2, \hat{l}_z$ com j semi-inteiro são excluídas

A não-uniformidade (troca de sinal p/ $\varphi \to \varphi + 2\pi$) viola a hermiticidade de $\hat{l}_z$:

$\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$ deve satisfazer

$$\int_0^{2\pi} \psi_1^*(\phi)\, \hat{l}_z\, \psi_2(\phi)\, d\phi = -i\hbar \int_0^{2\pi} \psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial \phi}\, d\phi$$

$$= \underbrace{-i\hbar \left(\psi_1^* \psi_2\right)\Big|_0^{2\pi}}_{\text{termo integrado}} + \underbrace{i\hbar \int_0^{2\pi} \frac{\partial \psi_1^*}{\partial \phi} \psi_2\, d\phi}_{= \int_0^{2\pi} (\hat{l}_z \psi_1)^* \psi_2\, d\phi}$$

O termo integrado deve ser $= 0$ p/ $\forall \psi_1, \psi_2$ (normalizáveis)

Mas, tomando p/ ex.

$$\left.\begin{aligned} \psi_1(\phi) &= \text{Const.} \quad (\text{autof. de } \hat{l}_z \text{ com } m = 0) \\ \psi_2(\phi) &= S_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta,\phi) = N_{\pm}(\operatorname{sen}\theta)^{1/2} e^{i\frac{\phi}{2}} \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\psi_1^* \psi_2 \Big|_0^{2\pi} = \text{Const.} \times \left[e^{i\frac{\phi}{2}}\right]_0^{2\pi} = \text{Const.} \times \underbrace{\left(e^{i\pi} - 1\right)}_{=-2} \neq 0$$

QED.

$\langle 0,0|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle \neq 0$ embora $j' \neq j$

~~a invariância rotacional. Cl estas singularidades, as (9.68) ~~~~deixam de satisfazer as eqs. gerais anteriores.~~~~ P/ ex.,~~ deveríamos ter, pelas (9.45),

$$\hat{\ell}_- \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{1\cdot 1}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \quad (9.72)$$

mas, pela (9.53),

$$\langle 0,\varphi|\hat{\ell}_-\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar e^{-i\varphi}\left(i\,\mathrm{cotg}\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\partial}{\partial\theta}\right) N_+ (\mathrm{sen}\,\theta)^{1/2} e^{i\frac{\varphi}{2}}$$

$$= \hbar e^{-i\varphi} N_+ \left(-\frac{1}{2}\,\mathrm{cotg}\,\theta\cdot\sqrt{\mathrm{sen}\,\theta}\, e^{i\frac{\varphi}{2}} - \frac{1}{2}\cos\theta\cdot(\mathrm{sen}\,\theta)^{-1/2} e^{i\frac{\varphi}{2}}\right)$$

$$= -\hbar\, N_+ e^{-i\frac{\varphi}{2}}\frac{\cos\theta}{\sqrt{\mathrm{sen}\,\theta}} = -\hbar\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \quad (9.73)$$

$$\propto -\cot\theta\,\langle 0,\varphi|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle$$

Dificuldades análogas são encontradas p/ todos os valores semi-inteiros de j, levando a 1 conclusão importante:

$$j = \ell = 0,1,2,\ldots \quad (9.74)$$

ou seja, os autovalores do momento angular orbital são inteiros (não podem ser semi-inteiros). Veremos + tarde q isto n é verdade p/ o mom. ang. intrínseco da partíc. (spin), q pode assumir valores semi-inteiros.

mas as autofunções não são funções de (θ,φ): são vetores coluna (como p/ o spin do fóton representando graus de liberdade INTERNOS)

Daqui por diante, usaremos a notação

$$\langle\theta,\varphi|\ell,m\rangle \equiv Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \quad (9.75)$$

Harmônicos esféricos

p/ as autofunções normalizadas de $\hat{\ell}^2$ e $\hat{\ell}_z$, com

$$\hat{\ell}^2 Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$$
$$\hat{\ell}_z Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = m\hbar\, Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \quad (9.76)$$

→ Importante

onde

$$\ell = 0,1,2,\ldots$$
$$\text{P/ cada } \ell\ \{\ m = -\ell, -\ell+1, \ldots -1, 0, 1, \ldots \ell \quad (9.77)$$
$$(2\ell+1) \text{ valores}$$

Pelas (9.67) e (9.64),

$$\boxed{Y_{l,\pm l}(\theta,\varphi) = \frac{N_{\pm,l}}{\sqrt{2\pi}} (\operatorname{sen}\theta)^l e^{\pm i l\varphi}} \quad (9.78)$$

onde $N_\pm$ deve ser tal que

$$\boxed{\int |Y_{l,\pm l}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \operatorname{sen}\theta\, d\theta\, |Y_{l,\pm l}(\theta,\varphi)|^2 = 1} \quad (9.79)$$

ou seja, pela (9.78),

$$1 = (N_{\pm,l})^2 \int_0^{\pi} \operatorname{sen}^{2l}\theta \underbrace{\operatorname{sen}\theta\, d\theta}_{-d(\cos\theta)} \cdot \left\{ \boxed{\frac{1}{(N_{\pm,l})^2} = \int_{-1}^{1} (1-x^2)^l dx} \right. \quad = I_{l,l}$$

$$I_{l,l} = \int_{-1}^{1} (1-x)^l (1+x)^l dx$$

$$= \int_{-1}^{1} (1-x)^l \underbrace{(1+x)^l}_{\frac{d}{dx}\frac{(1+x)^{l+1}}{l+1}} dx = \underbrace{\frac{(1-x)^l (1+x)^{l+1}}{(l+1)}\Big|_{-1}^{1}}_{=0} + \frac{l}{(l+1)} \int_{-1}^{1} (1-x)^{l-1} (1+x)^{l+1} dx$$

$$= \frac{l}{(l+1)} \int_{-1}^{1} (1-x)^{l-1} (1+x)^{l+1} dx = \frac{l(l-1)}{(l+1)(l+2)} \int_{-1}^{1} (1-x)^{l-2} (1+x)^{l+2} dx$$

$$= \ldots = \frac{l!}{(l+1)(l+2)\cdots(2l)} \underbrace{\int_{-1}^{1} (1+x)^{2l} dx}_{\frac{(1+x)^{2l+1}}{(2l+1)}} = \boxed{\frac{2^{2l+1}(l!)^2}{(2l+1)!}} \quad (9.80)$$

$$= \frac{(l!)^2}{(2l)!}$$

e que dá

$$\boxed{|N_{\pm,l}| = \frac{\sqrt{(2l+1)!}}{\sqrt{2}\cdot 2^l l!}} \quad (9.81)$$

Convenciona-se escolher a fase de $N_{\pm,l}$ como sendo dada por $(-1)^l$. Logo,

$$\boxed{Y_{l,\pm l}(\theta,\varphi) = \frac{(-)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \operatorname{sen}^l\theta\, e^{il\varphi}} \quad (9.82)$$

aula 9/11/92

A partir de $Y_{l,l}$, podemos construir os demais harmônicos esféricos Y_{lm} por aplicações sucessivas de $\hat{l}_-$.

$$(9.53)\left\{ \hat{l}_- = \hbar e^{-i\varphi}\left(i \operatorname{cotg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right.$$

(9.45) ↓

$$\boxed{\frac{\hat{l}_-}{\hbar} Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\, Y_{l,m-1}(\theta,\varphi)} \quad (9.83)$$

↓ cf. (9.64)

ou seja, considerando que $\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{\ell m} = im\, Y_{\ell m}$,

$$\boxed{Y_{\ell,m-1}(\theta,\varphi) = \frac{-e^{-i\varphi}}{\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + m\,\mathrm{cotg}\,\theta\right) Y_{\ell m}(\theta,\varphi)} \quad (9.84)$$

que é automaticamente normalizada.

9.8. Harmônicos Esféricos

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + m\,\mathrm{cotg}\,\theta\right) f(\theta) = \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + m\frac{\cos\theta}{\mathrm{sen}\,\theta}\right) f(\theta)$$

$$\boxed{\frac{d}{d\theta}\left[(\mathrm{sen}\,\theta)^m f\right] = \left[m(\mathrm{sen}\,\theta)^{m-1}\cos\theta\, f + (\mathrm{sen}\,\theta)^m \frac{df}{d\theta}\right]}$$

$$\boxed{= (\mathrm{sen}\,\theta)^m \left(\frac{d}{d\theta} + \frac{m\cos\theta}{\mathrm{sen}\,\theta}\right) f} \quad (9.85)$$

$$\frac{d}{d(\cos\theta)} = -\frac{1}{\mathrm{sen}\,\theta}\frac{d}{d\theta}$$

$$\therefore \frac{-d}{d(\cos\theta)}\left[(\mathrm{sen}\,\theta)^m f(\theta)\right] = (\mathrm{sen}\,\theta)^{m-1}\left(\frac{d}{d\theta} + m\,\mathrm{cotg}\,\theta\right) f(\theta)$$

$$\boxed{-\left(\frac{d}{d\theta} + m\,\mathrm{cotg}\,\theta\right) f(\theta) = (\mathrm{sen}\,\theta)^{1-m}\frac{d}{d(\cos\theta)}\left[\mathrm{sen}^m\theta\, f(\theta)\right]}$$

Temos então $Y_{\ell,m} = \frac{e^{-i\varphi}(\mathrm{sen}\,\theta)^{1-m}}{(\ell+m)(\ell-m+1)}\frac{d}{d(\cos\theta)}\left[\mathrm{sen}^m\theta \cdot (\quad)^m\right]$ (9.86)

$$Y_{\ell,\ell-1}(\theta,\varphi) = \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{(2\ell)\cdot 1}}(\mathrm{sen}\,\theta)^{1-\ell}\frac{d}{d(\cos\theta)}\left(\mathrm{sen}^{2\ell}\theta\right)\cdot\frac{(-)^\ell}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\cdot\sqrt{(2\ell)!}\; e^{i\ell\varphi}$$

ou seja,

$$\boxed{Y_{\ell,\ell-1}(\theta,\varphi) = \frac{(-)^\ell}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{(2\ell-1)!}{1!}}\, e^{i(\ell-1)\varphi}\,(\mathrm{sen}\,\theta)^{1-\ell}\frac{d}{d(\cos\theta)}(\mathrm{sen}^{2\ell}\theta)} \quad (9.87)$$

$$Y_{\ell,\ell-2}(\theta,\varphi) = \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{(2\ell-1)\,2}}(\mathrm{sen}\,\theta)^{2-\ell}\frac{d}{d(\cos\theta)}\left[(\mathrm{sen}\,\theta)^{\ell-1}(\mathrm{sen}\,\theta)^{1-\ell}\frac{d}{d\cos\theta}(\mathrm{sen}^{2\ell}\theta)\right]\cdot$$

$$\times\frac{(-)^2}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}}\sqrt{\frac{(2\ell-1)!}{1!}}\, e^{i(\ell-1)\varphi} \quad (9.88)$$

$$\boxed{Y_{\ell,\ell-2}(\theta,\varphi) = \frac{(-)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}}\sqrt{\frac{(2\ell-2)!}{2!}}\,(\mathrm{sen}\,\theta)^{2\ell}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^2(\mathrm{sen}^{2\ell}\theta)\, e^{i(\ell-2)\varphi}}$$

Após p aplicações, como é fácil ver por indução completa,

$$Y_{\ell,\ell-p}(\theta,\varphi) = \frac{(-)^\ell}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}}\sqrt{\frac{(2\ell-p)!}{p!}}\,(\operatorname{sen}\theta)^{p-\ell}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^p(\operatorname{sen}^{2\ell}\theta)\,e^{i(\ell-p)\varphi}$$

ou, fazendo $\ell - p = m$,

$$\boxed{Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = \frac{(-)^\ell}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}}\sqrt{\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}}\,(\operatorname{sen}\theta)^{-m}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell-m}(\operatorname{sen}^{2\ell}\theta)\,e^{im\varphi}} \quad (9.89)$$

Em particular, p/ $m = -\ell$,

$$Y_{\ell,-\ell}(\theta,\varphi) = \frac{(-)^\ell}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\,\frac{1}{\sqrt{(2\ell)!}}\,(\operatorname{sen}\theta)^{+\ell}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{2\ell}(\operatorname{sen}^{2\ell}\theta)\,e^{-i\ell\varphi}$$

$$\operatorname{sen}^{2\ell}\theta = (1-\cos^2\theta)^\ell = (-)^\ell(\cos\theta)^{2\ell} + \text{potências menores}$$

$$\therefore \boxed{\left(\frac{d}{d(\cos\theta)}\right)^{2\ell}(\operatorname{sen}^{2\ell}\theta) = (-)^\ell(2\ell)!} \quad (9.90)$$

Consistente com a (9.7)!

$$\Rightarrow \boxed{Y_{\ell,-\ell}(\theta,\varphi) = \frac{(-)^\ell}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}\,\operatorname{sen}^\ell\theta\,e^{-i\ell\varphi} = (-)^\ell Y^*_{\ell,\ell}(\theta,\varphi)} \quad (9.91)$$

Podemos agora construir $Y_{\ell,-\ell+1}$, $Y_{\ell,-\ell+2}$, ... $Y^*_{\ell,\ell}$ por aplicações sucessivas de $\hat{L}_+/\hbar$ a $Y_{\ell,-\ell}$, de forma inteiramente análoga ao que foi feito acima. O resultado que se encontra é uma expressão alternativa p/ $Y_{\ell m}$:

$$\boxed{Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = \frac{(-)^{\ell+m}}{2^\ell \ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}}\sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\,(\operatorname{sen}\theta)^m\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^{\ell+m}(\operatorname{sen}\theta)^{2\ell}\,e^{+im\varphi}} \quad (9.92)$$

Probl. 40. Demonstre este resultado, pelo método sugerido.

Substituindo m por $-m$ na (9.92) e comparando o resultado com a (9.89), obtemos a importante relação

$$Y_{l,-m}(\theta,\varphi) = (-)^m Y^*_{lm}(\theta,\varphi) \quad (9.93)$$

[Caso particular (9.91)]

que mostra ser suficiente calcular Y_{lm} para $m \geq 0$.

P/ os valores + baixos de l, achamos

$$\begin{aligned}
&l=0 \quad Y^0_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
&l=1 \quad \begin{cases} Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\mathrm{sen}\theta\, e^{\pm i\varphi} \\ Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \end{cases} \\
&l=2 \quad \begin{cases} Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\,\mathrm{sen}^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi} \\ Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,\mathrm{sen}\theta\cos\theta\, e^{\pm i\varphi} \\ Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3\cos^2\theta - 1) \end{cases}
\end{aligned} \quad (9.94)$$

Probl. 41. Verifique estes resultados.

Os harmônicos esféricos formam uma base ortonormal para expansão de $\forall$ função (quadraticamente integrável) de (θ,φ):

$$\langle l'm' | lm \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \mathrm{sen}\theta\, d\theta\, Y^*_{l'm'}(\theta,\varphi) Y_{lm}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \quad (9.95)$$

$$f(\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_{lm}\, Y_{lm}(\theta,\varphi) \quad (9.96) \quad \forall f$$

onde

$$C_{lm} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \mathrm{sen}\theta\, d\theta\, Y^*_{lm}(\theta,\varphi) f(\theta,\varphi) = (Y_{lm}, f) \quad (9.97)$$

17ª aula - 08-10-91

Relação dos polinômios de Legendre e funções de Legendre associadas

Para $m = 0$, a (9-89) dá

$$Y_{l,0}(\theta,\varphi) = \frac{(-)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^l (\mathrm{sen}\theta)^{2l}$$

o que se escreve (indep. de φ)

$$\boxed{Y_{\ell,0}(\theta) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\, P_\ell(\cos\theta)} \quad (9.98)$$

onde

$$P_\ell(\cos\theta) = \frac{(-)^\ell}{2^\ell \ell!}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^\ell (\operatorname{sen}\theta)^{2\ell}$$

ou seja

$$\boxed{P_\ell(x) = \frac{(-)^\ell}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}(1-x^2)^\ell,} \quad (9.99)$$

Fórmula de Rodrigues

que é um polinômio em x de grau ℓ, denominado polinômio de Legendre de grau ℓ.

A (9.99) mostra que

$$\boxed{P_\ell(-x) = (-)^\ell P_\ell(x)} \quad (9.100)$$

de modo que P_ℓ tem a paridade de ℓ. Temos (cf. (9.99)):

$$\boxed{\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \\ P_2(x) &= \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} \end{aligned}} \quad (9.101)$$

$$\frac{d^\ell}{dx^\ell}\left[(1-x)^\ell(1+x)^\ell\right]\Big|_{x=1} = \frac{d^\ell}{dx^\ell}(1-x)^\ell\Big|_{x=1}\,(1+x)^\ell\Big|_{x=1} + \cdots = (-)^\ell \ell!\, 2^\ell$$

É fácil verificar, a partir da (9.99), que

$$\boxed{P_\ell(1) = 1 \quad \therefore \quad P_\ell(-1) = (-1)^\ell} \quad (9.102)$$

A (9.95) com $m = m' = 0$ dá

$$\boxed{\int_0^\pi \operatorname{sen}\theta\, d\theta\, P_{\ell'}(\cos\theta) P_\ell(\cos\theta) = \int_{-1}^{1} P_{\ell'}(x) P_\ell(x)\, dx = \left(\frac{2}{2\ell+1}\right)\delta_{\ell\ell'}} \quad (9.103)$$

e a (9.96) se reduz a

$\forall f(\theta)$ quadrática integrável

$$\boxed{\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell P_\ell(\cos\theta) \\ c_\ell &= \left(\frac{2\ell+1}{2}\right)\int_0^\pi P_\ell(\cos\theta) f(\theta) \operatorname{sen}\theta\, d\theta \end{aligned}} \quad (9.104)$$

Eq. diferencial → Pelas (9.54) e (9.76)

$$\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} Y_{lm} = \blacksquare\, l(l+1) Y_{lm} = -\left[\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] Y_{lm}$$

ou seja,

$$\boxed{\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial Y_{lm}}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2\theta}\underbrace{\frac{\partial^2 Y_{lm}}{\partial\varphi^2}}_{-m^2 Y_{lm}} + l(l+1) Y_{lm} = 0} \quad (9.105)$$

Em partic., p/ $m = 0$,

$$\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}^2\theta \cdot \frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{dP_l}{d\theta}\right) + l(l+1) P_l(\cos\theta) = 0$$

$$\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{d}{d\theta} = -\frac{d}{d(\cos\theta)} = -\frac{d}{dx}$$

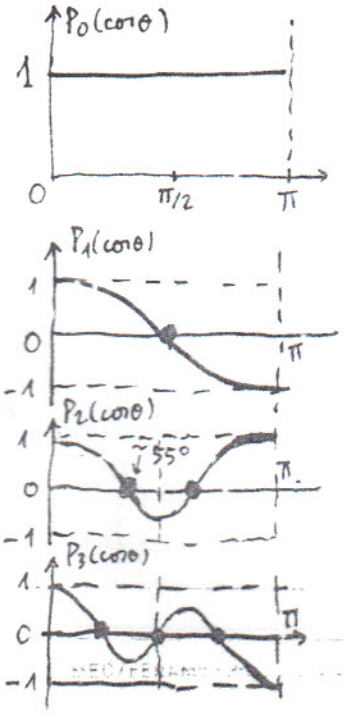
$$\therefore \quad \boxed{\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l}{dx}\right] + l(l+1) P_l(x) = 0} \quad (9.106)$$

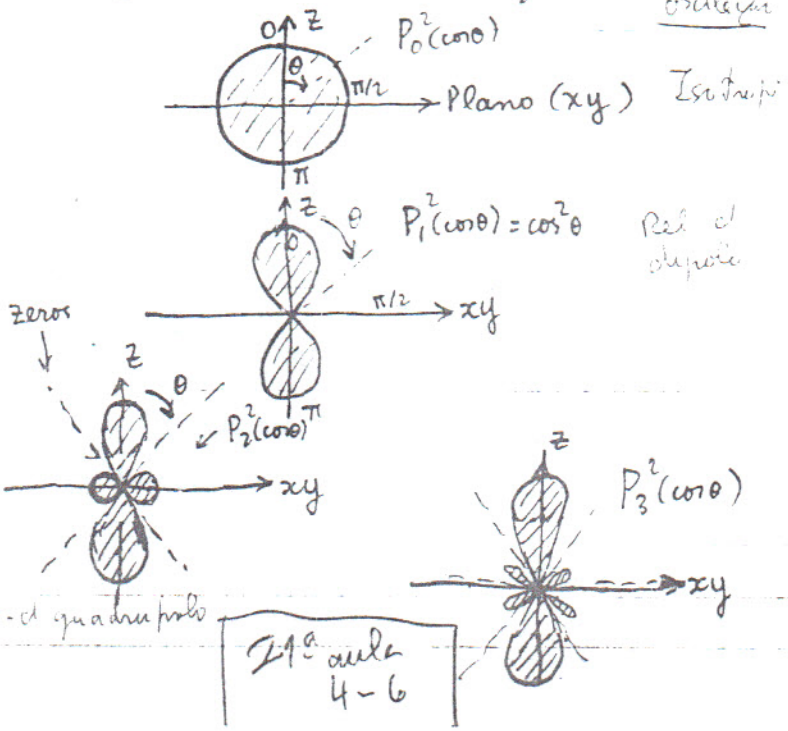
q é a eq. dif. dos polinômios de Legendre.

Zeros: Como $(1-x^2)^l$ se anula sòmente em $x = \pm 1$,
$\frac{d}{dx}(1-x^2)^l$ tem 1 zero entre esses 2 p/ (teor. de Rolle),
$\frac{d^2}{dx^2}(1-x^2)^l$ " 2 zeros " , e assim por diante.

Logo, $P_l(x)$ tem l zeros no intervalo $(-1, 1)$, ou seja, $P_l(\cos\theta)$ se anula em l direções no int. $(0, \pi)$. Pela (9.100), esses zeros são simétricos em rel. a $\theta = \frac{\pi}{2}$; p/ l ímpar, $x = 0$ $(\theta = \frac{\pi}{2})$ é sempre um zero.

oscilação





21ª aula
4-6

Funções de Legendre Associadas

Por definição, para $0 \leq m \leq \ell$,

$$P_\ell^m(x) \equiv (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x) \qquad (9.107)$$

chama-se a <u>função associada de Legendre de grau ℓ e ordem m</u>: é obviamente o produto de $(1-x^2)^{m/2}$ por um polinômio em x de grau $\ell - m$. Em particular,

$$P_\ell^0(x) = P_\ell(x) \qquad (9.108)$$

A (9.92) se escreve

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = (-)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} (\operatorname{sen}^2\theta)^{m/2} \left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^m \cdot \underbrace{\left\{\frac{(-)^\ell}{2^\ell \ell!}\left(\frac{d}{d\cos\theta}\right)^\ell (\operatorname{sen}\theta)^{2\ell}\right\}}_{P_\ell(\cos\theta)} e^{im\varphi}$$

ou seja,

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = (-)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\, e^{im\varphi} P_\ell^m(\cos\theta) \quad (m \geq 0).$$

Mas a (9.89) fb. vale p/ $m<0$, $m = -|m|$. Juntando-a a este resultado, vemos que

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \begin{cases} (-)^m \\ 1 \end{cases} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}\, P_\ell^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (-\ell \leq m \leq \ell) \qquad (9.109)$$

para $m<0$ $\rightarrow$ $Y_{\ell m} = (-)^m Y_{\ell,-m}$ $\rightarrow$ cf (9.93)

Pela (9.105), onde $\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} = -m^2$, a eq. diferencial das funções de Legendre associadas é

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_\ell^m}{dx}\right] + \left[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{(1-x^2)}\right] P_\ell^m(x) = 0 \qquad (9.110)$$

A (9.95) dá, cf $m = m'$,

$$\int_{-1}^{1} dx\, P_\ell^m(x) P_{\ell'}^m(x) = \int_0^\pi \operatorname{sen}\theta\, d\theta\, P_\ell^m(\cos\theta) P_{\ell'}^m(\cos\theta) = \frac{2}{(2\ell+1)} \cdot \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \delta_{\ell\ell'} \qquad (9.111)$$

Decorre da (9.107) e do Teorema de Rolle que $P_\ell^m(x)$ tem $(\ell-m)$ zeros no intervalo $-1<x<1$.

9.9. Interpretação Física

Vamos calcular $\langle \hat{l}_x \rangle$, $\langle \hat{l}_y \rangle$, Δl_x e Δl_y num estado $|l,m\rangle$.

$$\left.\begin{aligned} \hat{l}_+ &= \hat{l}_x + i\hat{l}_y \\ \hat{l}_- &= \hat{l}_x - i\hat{l}_y \end{aligned}\right\} \quad \boxed{\begin{aligned} \hat{l}_x &= \tfrac{1}{2}(\hat{l}_+ + \hat{l}_-) \\ \hat{l}_y &= -\tfrac{i}{2}(\hat{l}_+ - \hat{l}_-) \end{aligned}} \quad (9.112)$$

$\therefore$, como

$$\boxed{\langle l,m|\hat{l}_\pm|l,m\rangle \propto \langle l,m|l,m\pm1\rangle = 0} \quad (9.113)$$

temos

$$\boxed{\langle l,m|\hat{l}_x|l,m\rangle = \langle l,m|\hat{l}_y|l,m\rangle = 0} \quad (9.114)$$

ou seja, se $\hat{l}^2$ e $\hat{l}_z$ têm valores bem definidos, os valores esperados de $\hat{l}_x$ e $\hat{l}_y$ são $= 0$.

$$\therefore \boxed{\begin{aligned} (\Delta l_x)^2_{l,m} &= \langle l,m|\hat{l}_x^2|l,m\rangle = \frac{1}{4}\langle l,m|(\hat{l}_+^2 + \hat{l}_-^2 + \hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+)|l,m\rangle \\ (\Delta l_y)^2_{l,m} &= \langle l,m|\hat{l}_y^2|l,m\rangle = -\frac{1}{4}\langle l,m|(\hat{l}_+^2 + \hat{l}_-^2 - \hat{l}_+\hat{l}_- - \hat{l}_-\hat{l}_+)|l,m\rangle \end{aligned}} \quad (9.115)$$

Os termos em $\hat{l}_+^2$ e $\hat{l}_-^2$ não contribuem, pq levam $|l,m\rangle$ em vetores $\propto |l,m\pm2\rangle$. Logo,

$$\boxed{(\Delta l_x)^2_{l,m} = (\Delta l_y)^2_{l,m} = \frac{1}{4}\langle lm|\hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+|lm\rangle} \quad (9.116)$$

como era de esperar por simetria.

Pelas (9.29) e (9.30),

$$\boxed{\frac{1}{2}(\hat{l}_+\hat{l}_- + \hat{l}_-\hat{l}_+) = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2} \quad (9.117)$$

Logo,

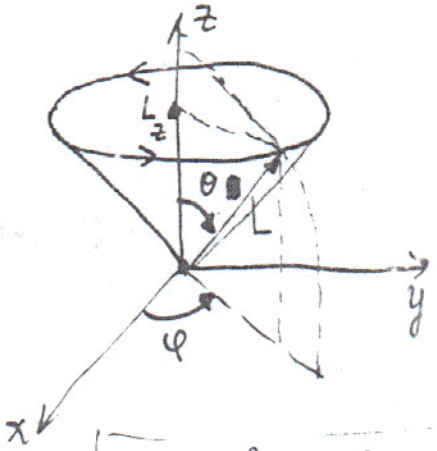
$$(\Delta l_x)^2_{lm} = (\Delta l_y)^2_{lm} = \frac{1}{2}\langle l,m|(\hat{l}^2 - \hat{l}_z^2)|l,m\rangle =$$

$$= \frac{1}{2}\hbar^2\left[l(l+1) - m^2\right]\underbrace{\langle l,m|l,m\rangle}_{=1}$$

ou seja,

$$\boxed{(\Delta l_x)_{lm} = (\Delta l_y)_{lm} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{l(l+1) - m^2}} \quad (9.118)$$

Os resultados acima sugerem o modelo vetorial do momento angular, que deve, porém, ser usado com cautela, como veremos.



Consideremos 1 momento Δn clássico de magnitude

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \qquad (9.119)$$

e cuja projeção sobre Oz é (fig.)

$$L_z = \hbar m = L\cos\theta \qquad (9.120)$$

$$\cos\theta = \frac{m}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}$$

Temos então

$$L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2 = \hbar^2[\ell(\ell+1) - m^2] \qquad (9.121)$$

e

$$L_x = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m^2}\,\cos\varphi$$
$$L_y = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m^2}\,\operatorname{sen}\varphi \qquad (9.122)$$

onde (θ,φ) define a direção do vetor $\underset{\sim}{L}$, que é classicamente bem definida (M $\underset{\sim}{L}$ conservado), definindo $\mathcal{H}$ o plano da órbita ($\perp \underset{\sim}{L}$)

Suponhamos agora que o ângulo φ, em lugar de ser bem definido, seja uma variável aleatória $\mathcal{A}$ = probab. de tomar qualquer valor entre 0 e 2π. (como se o vetor $\underset{\sim}{L}$ descrevesse todo o cone de direções de $\mathcal{L}$ de abertura θ com $\mathcal{A}$ = probab.). Isto poderia ser sugerido pelo fato de que $[\hat{L}_x, \hat{L}_z] \neq 0$, $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] \neq 0$, de modo que $\hat{L}_z$ bem definido $\Rightarrow$ $\hat{L}_x$ e $\hat{L}_y$ totalmente indefinidos p/ o mesmo $\hat{\underset{\sim}{L}}^2$. Temos então

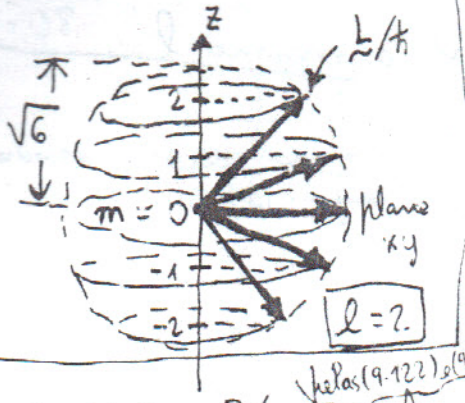
$$\langle\cos\varphi\rangle = \langle\operatorname{sen}\varphi\rangle = 0$$
$$\langle\cos^2\varphi\rangle = \frac{1}{2}\langle 1+\cos 2\varphi\rangle = \frac{1}{2} = \langle\operatorname{sen}^2\varphi\rangle \qquad (9.123)$$

de modo que as (9.122) dão

$$\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$$
$$\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle = \frac{\hbar^2}{2}[\ell(\ell+1)-m^2] \qquad (9.124)$$

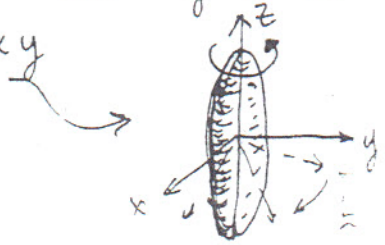
o q corresponde exatamente às (9.114) e (9.118).

ausia (11/11/92)



Isto leva ao modelo vetorial p/ $\underset{\sim}{L}/\hbar$ ilustrado ao lado, em q, p/ cada valor de m, o vetor $\underset{\sim}{L}$ deve ser pensado como equidistribuído sobre todo o cone de direções c/ eixo z. Entretanto, esta imagem tem de ser usada c/ cuidado, pois ainda não é equivalente à M.Q. P/ex., Pelas (9.122) e (9.123) Pelo sugere que os valores de $\hat{L}_x/\hbar$ e $\hat{L}_y/\hbar$ estejam distribuídos continuamente (espectro contínuo de autovalores) entre $-\sqrt{\ell(\ell+1)-m^2}$ e $+\sqrt{\ell(\ell+1)-m^2}$ num estado $|\ell, m\rangle$. Na realidade, $\hat{L}_x/\hbar$ ou $\hat{L}_y/\hbar$ só podem tomar valores bem definidos num autoestado deles, operadores, e eles têm autovalores discretos que, p/ 1 dado ℓ, variam entre $-\ell$ e ℓ, exatamente como os de $\hat{L}_z$ (se bem q c/ autovetores ≠s!), como é óbvio pela invariância rotacional. (Densidade de Probab. Associada a $Y_{\ell m}$)

Quanticamente, a interpret. física dos autoestados corresponde a representar a densidade de probab. em (θ,φ) por $|Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2$. P/ $m=0$, isso corresp. a $P_\ell^2(\cos\theta)$, que já foi representado nas figs. da pg. 181, q devem ser giradas em torno de Oz. Vemos q correspondem a "órbitas" c/ densidade cada vez + concentrada em torno de Oz, ∴ c/ $\underset{\sim}{L}$ no plano xy

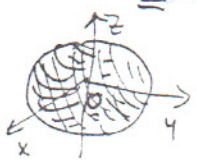


$|Y_{\ell m}|^2 \rightarrow$ ORBITAIS

Nomenclatura: $\ell = 0 \equiv$ onda s (da série espectroscópica "sharp")

Distrib. é esfericamente simétrica

$|Y_{00}|^2 = \frac{1}{4\pi}$ (sem nódos).



Veremos + adiante q p/ 1 pot. central $V(r)$ os autovalores da energia não dependem de m, o que é fisicamente óbvio, pq., devido à simetria esférica do prob., a escolha da direção z é arbitrária. Logo, como ∃m $(2\ell+1)$ autofunções indeps. $Y_{\ell m}$ $(m=-\ell,\ldots,\ell)$ p/ cada ℓ, teremos degenerescência de ordem $(2\ell+1)$: as autofunções formam um multipleto degenerado de ordem $(2\ell+1)$, e

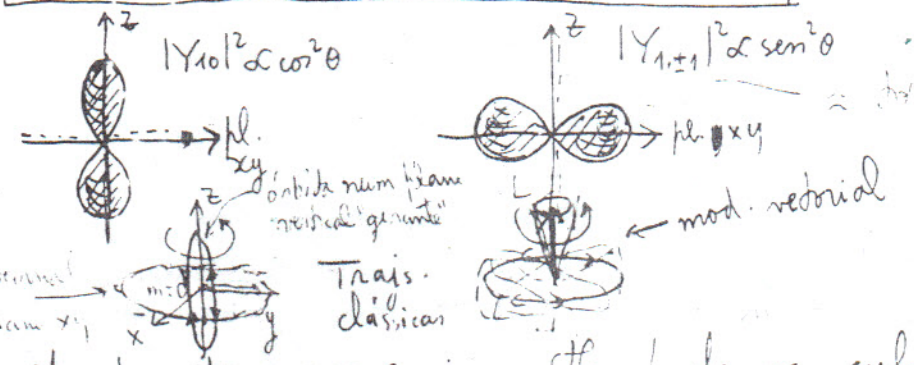
21ª aula 30-5

podemos tomar combs. lineares de ≠s m p/ o mesmo l

l = 1 ≡ ondas p (de principal series na espectroscopia)

$Y_{1,\pm1}$ e $Y_{1,0}$ constituem um tripleto degenerado

$$\begin{aligned} Y_{1,1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\mathrm{sen}\theta\, e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\frac{x+iy}{r}\right) \\ Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{z}{r} \\ Y_{1,-1} &= +\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\mathrm{sen}\theta\, e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\frac{x-iy}{r}\right) \end{aligned} \qquad (9.125)$$



Devido à degenerescência, H. podemos substituir as (9.125) por combs. lineares indeps., q são ≡s:

$$\begin{aligned} Y_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{1,-1} - Y_{1,1}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{x}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\mathrm{sen}\theta\cos\varphi \\ Y_y &= \frac{+i}{\sqrt{2}}\left(Y_{1,1} + Y_{1,-1}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{y}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\mathrm{sen}\theta\,\mathrm{sen}\varphi \\ Y_z &= Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\frac{z}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \end{aligned} \qquad (9.126)$$

que são as 3 componentes do vetor

$$\underset{\sim}{Y} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\hat{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,(\mathrm{sen}\theta\cos\varphi,\ \mathrm{sen}\theta\,\mathrm{sen}\varphi,\ \cos\theta) \qquad (9.127)$$

Quais são as superfícies nodais assoc.? P/ Y_z, $\theta = \frac{\pi}{2}$ (plano xy) = 1 suff.; P/ Y_x, $\varphi = \frac{\pi}{2}$ ou $\frac{3\pi}{2}$ (plano yz) = 1 suff. P/ Y_y, $\varphi = 0$ (ou 2π) (plano xz) = 1 suff. (a linha nodal $\theta = 0$ ou $\pi \equiv$ eixo Oz [illegible] p/ parte desses planos). Logo, nos 3 casos, Y_{1m} define 1 [illegible] (suff.) nodal (através das combs. lineares q entram em $\tilde{Y}$).

Orbitais p são importantes p/ compreender valências direcionadas.

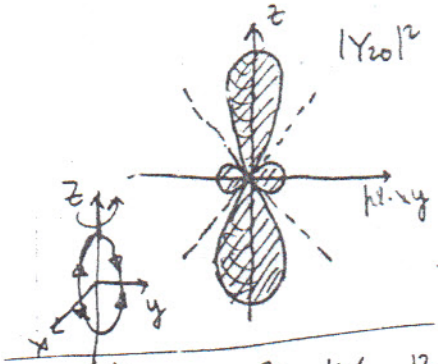
$l = 2$ = ondas d (de diffuse series em espectros)

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\,\operatorname{sen}^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi} \quad \{\ |Y_{2,\pm 2}|^2 \propto \operatorname{sen}^4\theta$$

$$Y_{2,\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,\operatorname{sen}\theta\cos\theta\, e^{\pm i\varphi} \quad \{\ |Y_{2,\pm 1}|^2 \propto \operatorname{sen}^2\theta\cos^2\theta \qquad (9.128)$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3\cos^2\theta - 1) \quad \{\ |Y_{2,0}|^2 \propto (3\cos^2\theta - 1)^2$$

Quintupleto degenerado ($2l+1 = 5$)

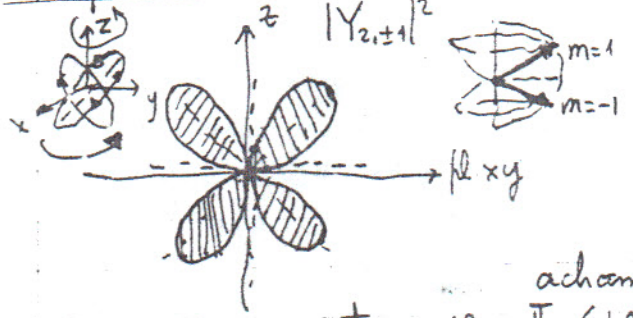


Suffs. nodais:

Mod. vetorial $\cos\theta = \pm\frac{1}{\sqrt{3}}$ = 2 cones (opostos pelo vértice)

$\theta = \theta_0$, $\theta = \pi - \theta_0$

$\theta = 0$ ou π é uma direção



Suffs. nodais

$\theta = \frac{\pi}{2}$ (plano xy) Máxs.: $\theta = \frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}$

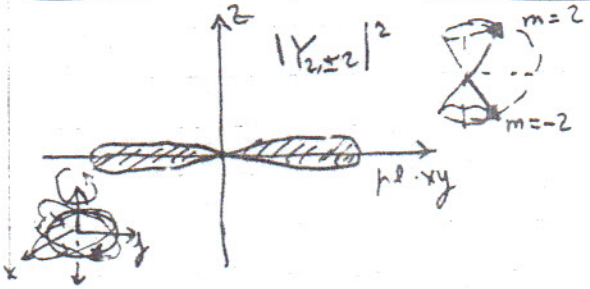
Tomando as combs. lineares, além desta

$Y_{2,1} \pm Y_{2,-1} \Rightarrow \begin{cases} \operatorname{sen}\varphi \\ \cos\varphi \end{cases}$

achamos nova θ, num caso; $\varphi = 0$ (pl. xz),

ou, no outro, $\varphi = \frac{\pi}{2}$ (pl. yz), $\therefore$ 2 suffs. nodais pl cada

(OU)



Suffs. nodais:

Tomando, combs. lineares

$Y_{2,2} \pm Y_{2,-2}$ $\begin{cases} \operatorname{sen} 2\varphi = 0 \begin{cases} \varphi = 0 \\ \varphi = \frac{\pi}{2} \end{cases} \\ \cos 2\varphi = 0 \begin{cases} \varphi = \frac{\pi}{4} \\ \varphi = \frac{3\pi}{4} \end{cases} \end{cases}$

q são os planos xz, yz ou seus bissetores (em ambos os casos, incluem o eixo Oz) 2 suffs. nodais

... e assim por diante

$l = 3$

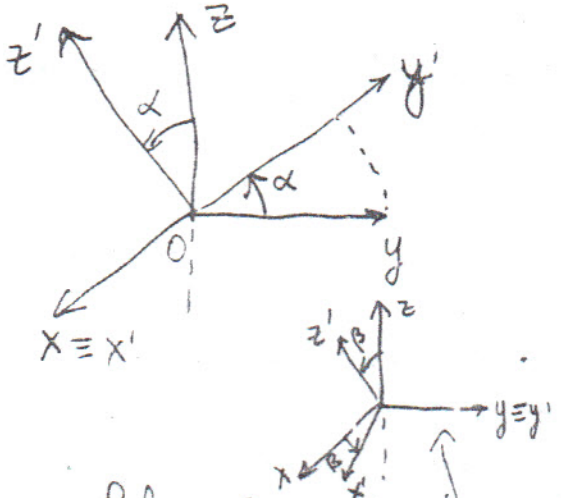
= ondas f = (fundamental)

(daí por diante: g, h, ...)

De modo geral, como vimos, $P_\ell^{|m|}(\cos\theta)$ tem $\ell - |m|$ zeros entre $\theta = 0$ e $\theta = \pi$; $e^{im\varphi} \pm e^{-im\varphi}$ (combs. lineares de $Y_{\ell,m}$ e $Y_{\ell,-m}$) tem $|m|$ zeros. Logo: $Y_{\ell m} \pm Y_{\ell,-m}$ tem ($+$ e $-$) $\ell - |m| + |m| = \ell$ superfícies nodais.
Além disso, vemos q as distribs. de probab. associs. a $|Y_{\ell m}|^2$ constituem a versão quântica correta do modelo vetorial; à medida que $|m|$ ~~aumenta~~ diminui, p/ ℓ fixo, aumenta a inclinação da "órbita" em relação ao plano equatorial xy (p/ $|m| = \ell$, a "órbita" se concentra no plano equatorial).

9.10. Rotações de eixos

Já foi dito q a escolha de um "eixo de quantização" Oz é arbitrária num problema em que há simetria esférica (pot. central $V(r)$). Isto deve refletir-se no comportamento dos harmônicos esféricos qdo se faz uma rotação de eixos: nenhuma informação física contida na função de onda do sistema deve alterar-se por rotação de coordenadas.
Isto é óbvio no caso de ondas s, em q a própria função de onda é indep^te de (θ, φ) (esfericamente simétrica), $\therefore$ invariante numa rotação de eixos.
Vejamos como funciona p/ ondas p ($\ell = 1$).
Consideremos, p/ ex., 1 rot. de coords. de um $\measuredangle \alpha$ em torno de Ox (fig.:)



$$\boxed{\begin{aligned} x &= x' \\ y &= y'\cos\alpha - z'\sin\alpha \\ z &= +y'\sin\alpha + z'\cos\alpha \end{aligned}} \qquad (9.129)$$

$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} = r'$

Pelas (9.125'), temos então

$$\begin{cases} z = z'\cos\beta + x'\sin\beta \\ x = -z'\sin\beta + x'\cos\beta \end{cases}$$

melhor usar $\beta \equiv \measuredangle$ de Euler β

$$Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\cdot\frac{1}{r'}\left\{x' + i(y'\cos\alpha - z'\operatorname{sen}\alpha)\right\}$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cdot\frac{1}{r'}\left(y'\operatorname{sen}\alpha + z'\cos\alpha\right)$$

$$Y_{1,-1} = +\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\cdot\frac{1}{r'}\left\{x' - i(y'\cos\alpha - z'\operatorname{sen}\alpha)\right\}$$

ou seja, com $x' = \frac{1}{2}(x'+iy') + \frac{1}{2}(x'-iy')$, $iy' = \frac{1}{2}(x'+iy') - \frac{1}{2}(x'-iy')$,

$$Y_{1,\pm1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\cdot\frac{1}{r'}\left\{\frac{1}{2}(x'+iy') + \frac{1}{2}(x'-iy') \pm \cos\alpha\left[\frac{1}{2}(x'+iy') - \frac{1}{2}(x'-iy')\right] \mp i\operatorname{sen}\alpha\, z'\right\}$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cdot\frac{1}{r'}\left\{-\frac{i}{2}\left[(x'+iy') - (x'-iy')\right] \mp \operatorname{sen}\alpha + z'\cos\alpha\right\}$$

ou q dá

$$Y_{1,\pm1} = \left\{\frac{1}{2}(Y'_{1,1} - Y'_{1,-1}) \pm \cos\alpha\left[\frac{1}{2}(-Y'_{1,1} - Y'_{1,-1})\right] \pm \frac{i\operatorname{sen}\alpha}{\sqrt{2}}\, Y'_{1,0}\right.$$

$$Y_{1,0} = \frac{i}{\sqrt{2}}(Y'_{1,1} + Y'_{1,-1}) \mp \operatorname{sen}\alpha + \cos\alpha\, Y'_{1,0}$$

ou seja,

$$\boxed{\begin{aligned}
Y_{1,1} &= \frac{1}{2}(1-\cos\alpha)\,Y'_{1,1} + \frac{i}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\alpha\, Y'_{1,0} - \frac{1}{2}(1+\cos\alpha)\,Y'_{1,-1} \\
Y_{1,0} &= -\frac{i\operatorname{sen}\alpha}{\sqrt{2}}Y'_{1,1} + \cos\alpha\, Y'_{1,0} + \frac{i\operatorname{sen}\alpha}{\sqrt{2}}Y'_{1,-1} \\
Y_{1,-1} &= \frac{1}{2}(1+\cos\alpha)\,Y'_{1,1} - \frac{i}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\alpha\, Y'_{1,0} - \frac{1}{2}(1-\cos\alpha)\,Y'_{1,-1}
\end{aligned}} \qquad (9.130)$$

mostrando que os harmônicos esféricos do sist. antigo cl $l=1$ são combinações lineares dos do sist. novo cl o mesmo l.

Pode-se mostrar q isto é geral, ou seja, que

$$\boxed{Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \sum_{m'=-l}^{l} D^{l}_{m,m'}\, Y_{l,m'}(\theta',\varphi')} \qquad (9.131)$$

Os harms. esféricos do mesmo l se transformam entre si

numa rot. de eixo que leva $(\theta,\varphi) \to (\theta',\varphi')$, onde os coefs. $D^{l}_{m,m'}$ (matrizes de rotação) dependem dos parâmetros q definem a rot. de eixo (p/ ex, os ângs de Euler α,β,γ).

Assim, se $l=1$ e $m=0$ no velho sistema, $l=1$ no novo sist. e a função de onda é 1 superposição de $m=-1, 0, 1$, cl probabils. respectivas

$$P_{m'=1} = \left| \frac{i \operatorname{sen}\alpha}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}\operatorname{sen}^2\alpha$$

$$P_{m'=0} = \cos^2\alpha$$

$$P_{m'=-1} = \left| \frac{-i \operatorname{sen}\alpha}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}\operatorname{sen}^2\alpha$$

$$P_{m'=1} + P_{m'=0} + P_{m'=-1} = 1 \qquad (9.132)$$

e analogamente nos demais casos.

P/ $\alpha = \frac{\pi}{2}$, por ex., $P_{m'=\pm 1} = \frac{1}{2}$, $P_{m'=0} = 0$.

Logo, se $m=0$ no velho sist., há =s probabs. de q seja ± 1 no novo. Mas, p/ $\alpha = \frac{\pi}{2}$, $z' \equiv -y$. Logo, no velho sist., se $\hat{l}_z = 0$, há =s probabs. (de $\frac{1}{2}$) de q se tenha $\hat{l}_y = +1$ ou $\hat{l}_y = -1$, ilustrando + uma vez q o valor de l_y é indefinido (o mmo. se aplica a l_x).

Uma função de onda arbitrária, cl $l=1$, é da forma

$$\psi = R_1 Y_{1,1} + R_0 Y_{1,0} + R_{-1} Y_{1,-1} \qquad (9.133)$$

(Constantes, pl depend. angulen)

onde R_1, R_0, R_{-1} são indeps. de θ, φ.

Se substituirmos as (9.130), obteremos obviamente 1 comb. linear análoga de $Y'_{1,1}$, $Y'_{1,0}$ e $Y'_{1,-1}$, cl coefs. q são combs. lineares de R_1, R_0, e R_{-1}. Isto ilustra explicitamente a independência dos results. físicos da escolha do eixo de quantização z: obtemos descrições equivalentes

---

Probl. 42. Mostre que $|R'_1|^2 + |R'_0|^2 + |R'_{-1}|^2 = |R_1|^2 + |R_0|^2 + |R_{-1}|^2 \equiv 1$

Probl. 42a. Calcule

$$\sum_{m=-l}^{l} |Y_{l,m}(\theta,\phi)|^2$$

para $l = 0, 1$ e 2, mostrando que o resultado é independente de θ e ϕ

---

10. POTENCIAIS CENTRAIS

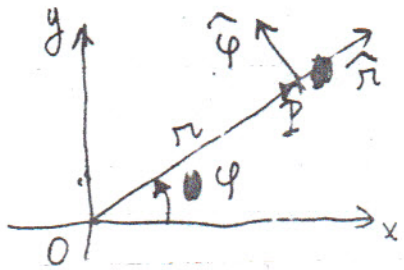
10.1. Mec. Clássica

$$V = V(r) \Rightarrow \underset{\sim}{F} = -\nabla V = -\frac{dV}{dr}\hat{r} \qquad (10.1)$$

Já vimos q isto $\Rightarrow$ na conservação de, além da energia E, do mom. ang.

$$\underset{\sim}{\ell} = \underset{\sim}{r} \times \underset{\sim}{p} = m\, \underset{\sim}{r} \times \dot{\underset{\sim}{r}} \qquad (10.2)$$

bem como no fato de que a órbita é plana, permanecendo no plano $(\underset{\sim}{r}_0, \underset{\sim}{p}_0)$.



Se tomarmos este plano como plano $(x,y) = (r,\varphi)$, teremos

$$\dot{\underset{\sim}{r}} = \dot{r}\hat{r} + r\dot{\varphi}\hat{\varphi} \qquad (10.3)$$

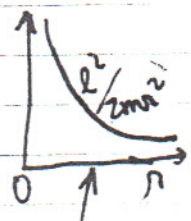
$$T = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\varphi}^2 \;;\; V = V(r) \qquad (10.4)$$

$\therefore$

$$E = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + V(r) \qquad (10.5)$$

$$\underset{\sim}{\ell} = m\, \underbrace{\underset{\sim}{r} \times \dot{\underset{\sim}{r}}}_{r\,r} = m r^2 \dot{\varphi}\,\hat{z} \qquad (10.6)\ (\hat{r} \times \hat{\varphi} = \hat{z})$$

$\therefore$ $\ell^2 = m^2 r^4 \dot{\varphi}^2$ $\left\{ \frac{1}{2}mr^2\dot{\varphi}^2 = \frac{\ell^2}{2mr^2} \right.$ (10.7)



ou seja,

$$E = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \left[V(r) + \frac{\ell^2}{2mr^2}\right] \qquad (10.8)$$

q é análoga à energia p/ o movto 1-D (radial) num potencial efetivo

$$U_\ell(r) = V(r) + \frac{\ell^2}{2mr^2} \qquad (10.9)$$

restrito a $r \geq 0$ (10.10)

melhor: $V_{eff,\ell}$

"Potencial centrífugo". Cresce c/ ℓ^2 e c/ $\frac{1}{r^2}$; é repulsivo

$$-\frac{d}{dr}\left(\frac{\ell^2}{2mr^2}\right) = -\frac{\ell^2}{2m}\frac{(-2)}{r^3}$$

$$\therefore \boxed{-\nabla\left(\frac{\ell^2}{2mr^2}\right) = \frac{\ell^2}{mr^3}\hat{r} = m\dot{\varphi}^2 r\,\hat{r}} \quad (10.11)$$

$= m\omega^2 \underset{\sim}{r}$ = "força centrífuga"

(num referencial em rot. c/ a veloc. ∡r instantânea $\dot{\varphi}$, a partícula se move puram^te na direção radial, o q explica a descrição em termos da "força centrífuga").

10.2. Separação da eq. de Schrödinger em coords. esféricas

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(r)\psi} \quad (10.12)$$

Estados estacs.

$$\boxed{\psi(r,\theta,\varphi,t) = \phi_E(r,\theta,\varphi)\,e^{-iEt/\hbar}} \quad (10.13)$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi_E(r,\theta,\varphi) + V(r)\phi_E(r,\theta,\varphi) = E\phi_E(r,\theta,\varphi)} \quad (10.14)$$

Eq. de Schröd. indep^te do tpo.

Δ em coords. esféricas

É dado por

$$\boxed{\Delta f(r,\theta,\varphi) = \underbrace{\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rf)}_{=\frac{\partial^2 f}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial f}{\partial r} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right)} + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2}} \quad (10.1$$

Comparando c/ a (9.54),

$$\boxed{\Delta f(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rf) - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{\underset{\sim}{\ell}}^2 f} \quad (10.16)$$

operador $\hat{\underset{\sim}{\ell}}^2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\phi_E)+\left[V(r)+\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}\right]\phi_E = E\phi_E\,, \qquad (10.17)$$

↑ p/ $r\phi_E$, é como a eq. de Schröd. 1-D

o q podemos comparar cl a (10.8).

Separação de variáveis

Procuremos soluções da forma

$$\phi_E(r,\theta,\varphi) = R(r)\,S(\theta,\varphi) \qquad (10.18)$$

(variáveis separadas)

$$S(\theta,\varphi)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR)+(V(r)-E)R\right] = \frac{-R}{2mr^2}\hat{l}^2 S(\theta,\varphi)$$

↑ só opera sobre θ e φ

ou seja

$$\frac{2mr^2}{R(r)}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}[rR(r)]+[V(r)-E]R(r)\right\} = \frac{-\hat{l}^2 S(\theta,\varphi)}{S(\theta,\varphi)} \quad \forall(r,\theta,\varphi) \qquad (10.19)$$

(= função só de r) (= função só de (θ,φ))

o q só é possível se ambos os mbros forem =s a uma constante $-\lambda$, ou seja,

$$\hat{l}^2 S_\lambda(\theta,\varphi) = +\lambda S_\lambda(\theta,\varphi) \qquad (10.20)$$

e

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}[rR_\lambda(r)]+[V(r)-E]R_\lambda(r) = \frac{-\lambda}{2mr^2}R_\lambda(r) \qquad (10.21)$$

Ao mmo tpo, ϕ_E deve ser normalizável.

Comparando cl a (10.20) cl a (9.76), concluímos que

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1)$$
$$S(\theta,\varphi) = Y_{l,m}(\theta,\varphi) \qquad (10.22)$$

potencial centrífugo quântico

com

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}[rR_{lm}(r)]+\underbrace{\left[V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]}_{\text{Eq. radial}}R_{lm}(r) = ER_{lm}(r) \qquad (10.23)$$

Como previsto, a eq. rad. depende de m (nº quânt. azimutal) ∴ E só pode depender de l (degenerescência)

10.3. A Equação Radial

Finalmente, se fizermos

$$R_{\ell}(r) = \frac{u_\ell(r)}{r} \qquad (10.24) \qquad [u_\ell(r) = r R_\ell(r)]$$

+ consistente: $u_{E,\ell}(r)$

obtemos

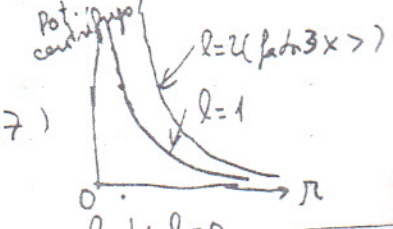
$$\Phi_{E,\ell,m}(r,\theta,\varphi) = \frac{u_\ell(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \qquad (10.25)$$

onde (multiplicando ambos os mbros da (10.23) por r)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_\ell}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}\right]u_\ell(r) = E\,u_\ell(r) \qquad (r \geq 0) \qquad (10.26$$

que é idêndica à eq. de Schröd 1-D na semi-reta $r \geq 0$ ("barreira impenetrável" em $r=0$) p/ 1 partíc. q se move no potencial efetivo

$$U_\ell(r) = V(r) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} \qquad (10.27)$$



"potencial centrífugo" → nulo p/ $\ell=0$

aula (16/11/97

Comportamento de $u_\ell(r)$ p/ $r \to 0$

Cond. de normalização: Como $Y_{\ell m}$ já é normalizado na (10.25), devemos ter

$$\int_0^\infty r^2 dr\, R_\ell^2(r) = \int_0^\infty u_\ell^2(r)\,dr = 1 \qquad (10.28)$$

P/ $r \to 0$, o pot. centrífugo na (10.26) é singular ($\ell \neq 0$), e, supondo que $V(r)$ é menos singular que r^{-2} p/ $r \to 0$ (o q inclui o potencial coulombiano), a eq. ≠al., p/ $r \to 0$, é dominada por (10

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_\ell}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u_\ell \approx 0 \quad \left\{ \quad \frac{d^2u_\ell}{dr^2} = +\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u_\ell \quad (r \to 0 \right.$$

cuja sol. geral é da forma

$$u_\ell(r) \approx A_\ell r^{\ell+1} + \frac{B_\ell}{r^\ell} \quad (r \to 0) \qquad (10.30)$$

: na origem

[redacted] p/ $l \geq 1$, o 2º termo $\bar{n}$ é quadraticamente sável, ou seja, $\bar{n}$ é compatível c/ a (10.28), $\therefore B_l = 0$. P/ $l = 0$, teríamos

$$\boxed{u_l(0) = B_0} \quad (10.31)$$

ou seja,

$$\boxed{R_0(r) \approx \frac{B_0}{r} \quad (r \to 0)} \quad (10.32)$$

e, como $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, isto daria

$$\boxed{\Phi_E(r,\theta,\varphi) \approx \frac{C}{r} \quad \text{p/ } r \to 0,\ l = 0} \quad (10.33)$$

(C: constante)

Mas este é o potencial de uma carga C puntiforme na origem, de modo q satisfaz à eq.

$$\boxed{\Delta\Phi_E \approx -4\pi C\,\delta(\vec{x}) \quad (+\text{termos regulares}) \text{ p/ } r \to 0} \quad (10.34)$$

(δ de Dirac)

em lugar da eq. de Schrödinger. Logo, a (10.32) ob. é inadmissível se $B_0 \neq 0$, de modo que a (10.30) dá

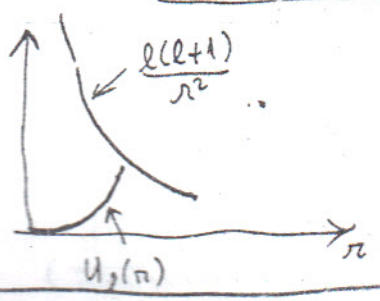
$$\boxed{u_l(0) = 0} \quad (10.35) \qquad l \geq 0$$

Cond. de contorno de barreira impenetrável na origem

Cf a cond. de normaliz. (10.28), vemos que $u_l(r)$ é exata e equivalente à sol. do Probl. de Schröd 1-D no potencial efetivo (10.27) c/ uma barreira impenetrável em $r=0$

Pela (10.30), vemos ainda q o comportamento esperado de $u_l(r)$ p/ $r \to 0$ é

$$\boxed{u_l(r) \approx A_l\, r^{l+1} \quad (r \to 0)} \quad (10.36)$$



q é 1 parábola de grau $(l+1)$.

Obs.: > l, < a probab. de encontrar a partícula perto da origem, o q se deve à barreira centrífuga (fig.).

21ª aula - 1-6

10.4. Partículas livres

Corresponde ao caso particular

$$\boxed{V(r) = 0} \quad (10.37)$$

e os estados estacionários já foram obtidos, em coords. cartesianas, como superposições de ondas planas propagando-se em todas as direções, cf. o mesmo nº de onda

$$k = |\underset{\sim}{k}| = \frac{|\underset{\sim}{p}|}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad (10.38)$$

(cf. (6.46)$_a$ (6.48))

Agora trata-se de representar as sols em termos de autofunções em coords. esféricas.

Fazendo $V(r) = 0$ e

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \qquad (10.39)$$

na (10.26), ela fica

$$\ell(\ell+1) = \ell^2 + \ell + \frac{1}{4} - \frac{1}{4} = \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}$$

$$\boxed{\frac{d^2 u_\ell}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] u_\ell(r) = 0} \qquad (10.40)$$

$(r \geq 0)$

Mud. de variável

$$u_\ell(r) = r^{1/2} V_\ell(r) \qquad (10.41)$$

$$\frac{du_\ell}{dr} = r^{1/2} \frac{dV_\ell}{dr} + \frac{1}{2} r^{-1/2} V_\ell$$

$$\frac{d^2 u_\ell}{dr^2} = r^{1/2} \frac{d^2 V_\ell}{dr^2} + r^{-1/2} \frac{dV_\ell}{dr} - \frac{1}{4} r^{-3/2} V_\ell$$

$$= r^{1/2}\left(\frac{d^2 V_\ell}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dV_\ell}{dr} - \frac{V_\ell}{4r^2}\right) \qquad (10.42)$$

Logo, substituindo na (10.40), vem

$$\boxed{\frac{d^2 V_\ell}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dV_\ell}{dr} + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1) + \frac{1}{4}}{r^2}\right] V_\ell = 0} \qquad (10.43)$$

ou seja, dividindo por k^2 e fazendo

$$kr = \rho, \qquad (10.44)$$

$$\boxed{\frac{d^2 V_\ell}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dV_\ell}{d\rho} + \left[1 - \frac{(\ell+\frac{1}{2})^2}{\rho^2}\right] V_\ell(\rho) = 0} \qquad (10.45)$$

que é a eq. tal das funções (de Bessel) de ordem $(\ell + \frac{1}{2})$

(cilíndricas)

Esta eq. tem 2 tipos de sols. linearmente indeps.: as funções de Bessel, q são regulares na origem, e as de Neumann, q são singulares p/ $\rho \to 0$, devendo ser excluídas. Logo, as únicas sols. admissíveis são

$$\boxed{V_\ell(\rho) = a_\ell J_{\ell+\frac{1}{2}}(\rho)} \quad (10.46) \Rightarrow R_\ell(r) = \frac{u_\ell(r)}{r} \propto \frac{J_{\ell+\frac{1}{2}}(\rho)}{\sqrt{\rho}}$$

Entretanto, é possível construir as sols. por um método direto, sem supor conhecidas as propriedades das funções de Bessel. P/ isto, voltemos à (10.40) q. p/ $\ell = 0$, se escreve

$$\boxed{\frac{d^2u_0}{dr^2} + k^2 u_0 = 0} \quad \left\{ u_0(r) = A_0 \operatorname{sen}(kr) + B_0 \cos(kr) \right.$$

Como vimos na (10.31), (10.47) tem de ser $B_0 = 0$, ou seja,

$$u_0(\rho) = A_0 \operatorname{sen}\rho \quad \left\{ \boxed{R_0(\rho) = N_0 \frac{\operatorname{sen}\rho}{\rho}} \right. \quad (10.48)$$

onde N_0 é 1 fator de normalização no espectro contínuo (como as ondas planas, as autofunções são normalizáveis neste sentido: o espectro de E é: $E \geq 0$).

P/ $\ell \geq 1$, voltemos à eq. radial (10.23), c/ $V = 0$, $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$:

$$-\underbrace{\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR_\ell)}_{-\frac{d^2R_\ell}{dr^2} - \frac{2}{r}\frac{dR_\ell}{dr}} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R_\ell = k^2 R_\ell$$

ou, em termos de ρ,

$$\boxed{\frac{d^2R_\ell}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR_\ell}{d\rho} + \left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]R_\ell = 0} \quad (10.49)$$

Seja (note que, pelas (10.32) e (10.36), $R_\ell \approx \rho^\ell$ p/ $r \to 0$)

$$\boxed{R_\ell = \rho^\ell f_\ell(\rho)} \quad (10.50)$$

$$\frac{dR_\ell}{d\rho} = \rho^\ell f_\ell' + \ell\rho^{\ell-1} f_\ell \quad ; \quad \frac{d^2R_\ell}{d\rho^2} = \rho^\ell f_\ell'' + 2\ell\rho^{\ell-1} f_\ell' + \ell(\ell-1)\rho^{\ell-2} f_\ell$$

$$\therefore \rho^\ell f_\ell'' + 2\ell\rho^{\ell-1} f_\ell' + \ell(\ell-1)\rho^{\ell-2} f_\ell + 2\rho^{\ell-1} f_\ell' + 2\ell\rho^{\ell-2} f_\ell + \rho^\ell f_\ell$$

$$- \ell(\ell+1)\rho^{\ell-2} f_\ell = 0 \Rightarrow f_\ell'' + \frac{(2\ell+2)}{\rho} f_\ell' + \left\{ \underbrace{\ell(\ell-1) + 2\ell - \ell(\ell+1)}_{=0} \right\} \frac{f_\ell}{\rho^2}$$

$$+ f_\ell = 0$$

o que era de esperar, pois ele é responsável pelo comportam.to (10.50) p/ $\rho \to 0$

ou seja, eliminamos o pot. centrífugo c/ esta substituição:

$$\boxed{f''_\ell + 2\frac{(\ell+1)}{\rho} f'_\ell + f_\ell = 0} \quad (10.51)$$

Derivando em relação a ρ,

$$f'''_\ell + 2\frac{(\ell+1)}{\rho} f''_\ell - \frac{2(\ell+1)}{\rho^2} f'_\ell + f'_\ell = 0$$

ou seja,

$$\boxed{f'''_\ell + \frac{2(\ell+1)}{\rho} f''_\ell + \left[1 - \frac{2(\ell+1)}{\rho^2}\right] f'_\ell = 0} \quad (10.52)$$

que é satisfeita por

$$\boxed{f'_\ell = \frac{df_\ell}{d\rho} = \rho\, f_{\ell+1}(\rho)} \quad (10.53)$$

Com efeito, isto dá

$$f''_\ell = \rho f'_{\ell+1} + f_{\ell+1}$$

$$f'''_\ell = \rho f''_{\ell+1} + 2 f'_{\ell+1}$$

e, levando na (10.52),

$$0 = \rho f''_{\ell+1} + 2 f'_{\ell+1} + 2(\ell+1)\left[f'_{\ell+1} + \frac{f_{\ell+1}}{\rho}\right] + \left[1 - \frac{2(\ell+1)}{\rho^2}\right]\rho f_{\ell+1}$$

$$= \rho\left\{ f''_{\ell+1} + \frac{2(\ell+2)}{\rho} f'_{\ell+1} + f_{\ell+1} \right\}$$

ou seja,

$$\boxed{f''_{\ell+1} + \frac{2(\ell+2)}{\rho} f'_{\ell+1} + f_{\ell+1} = 0} \quad (10.54)$$

que coincide efetivamente com a (10.51) com $\ell \to \ell+1$.

Logo, pela (10.53), vale a relação de recorrência.

$$\boxed{f_{\ell+1}(\rho) = \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right) f_\ell(\rho)} \quad (10.55)$$

~~e as (10.48) e (10.50) dão~~

~~$R_1(\rho) = \rho\, f_1(\rho) = \rho \cdot \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right) f_0(\rho)$~~

o que é: $f_1 = \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right) f_0$, $f_2 = \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^2 f_0$, ...

$$f_\ell(\rho) = \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell f_0(\rho) \qquad (10.56)$$

e, levando no (10.50), com a (10.48),

$$R_\ell = N'_\ell \rho^\ell \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \left(\frac{\operatorname{sen}\rho}{\rho}\right) \qquad (\text{p/ } \ell=0,\ R_\ell \equiv R_0)$$

Por definição, a <u>função esférica de Bessel de ordem ℓ</u> é

$$j_\ell(\rho) = (-)^\ell \rho^\ell \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \left(\frac{\operatorname{sen}\rho}{\rho}\right) \qquad \ell = 0,1,2,\ldots \qquad (10.57)$$

Note que não há cancelamento $\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^2 = \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)$

e temos

$$R_{\ell,E}(r) = N_\ell\, j_\ell(kr) \qquad (k = \sqrt{2mE}/\hbar) \qquad (10.58)$$

<u>Comportamento p/ $\rho \to \infty$</u>

Obtém-se derivando somente $\operatorname{sen}\rho$ (c/ outro termo tem fatores que são potências de $\frac{1}{\rho}$): (10.59)

$$j_\ell(\rho) \approx (-)^\ell \rho^\ell \frac{1}{\rho^\ell}\frac{1}{\rho}\frac{d^\ell}{d\rho^\ell}(\operatorname{sen}\rho) = \frac{(-)^\ell}{\rho}\frac{d^\ell}{d\rho^\ell}\operatorname{sen}\rho \qquad (\rho \to \infty)$$

$$-\frac{d}{d\rho}\operatorname{sen}\rho = -\cos\rho = +\operatorname{sen}\left(\rho - \frac{\pi}{2}\right) \qquad -\frac{d^3}{d\rho^3}\operatorname{sen}\rho = \cos\rho = \operatorname{sen}\left(\rho - \frac{3\pi}{2}\right)$$

$$\frac{d^2}{d\rho^2}\operatorname{sen}\rho = -\operatorname{sen}\rho = \operatorname{sen}(\rho - \pi) \qquad \therefore \quad (-)^\ell \frac{d^\ell}{d\rho^\ell}\operatorname{sen}\rho = \operatorname{sen}\left(\rho - \ell\frac{\pi}{2}\right) \qquad (10.60)$$

ou seja,

$$j_\ell(\rho) \approx \frac{\operatorname{sen}\left(\rho - \ell\frac{\pi}{2}\right)}{\rho} \qquad (\rho \to \infty) \qquad (10.61)$$

<u>Comportamento p/ $\rho \to 0$</u>

$$\frac{\operatorname{sen}\rho}{\rho} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n \rho^{2n}}{(2n+1)!} \qquad (10.63)$$

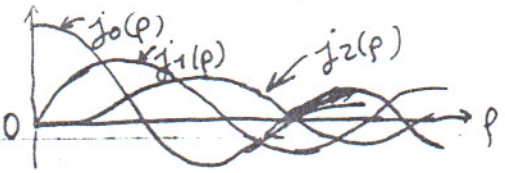
$$\rho^2 = z \qquad \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho} = 2\frac{d}{dz} \qquad (10.64)$$

$$2\rho\, d\rho = dz$$

$$j_\ell(\rho) = (-)^\ell \rho^\ell \left(\frac{d}{dz}\right)^\ell 2^\ell \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n z^n}{(2n+1)!}$$

O termo dominante p/ $z \to 0$ é o de + baixo grau que contribui:

$$\rho \to 0 \left\{ j_\ell(\rho) \approx (-)^\ell \rho^\ell \cdot 2^\ell \frac{d^\ell}{dz^\ell}\left[\frac{(-)^\ell z^\ell}{(2\ell+1)!}\right] = \frac{2^\ell \rho^\ell \ell!}{(2\ell+1)!}\right.$$



ou seja,

$$\boxed{j_l(\rho) \approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!}\rho^l \quad (\rho \to 0),} \quad (10.65)$$

levando a $u_l(r) \propto r^{l+1}$ $(r \to 0)$, o que concorda com a (10.36).

As autofunções p/ os valores + baixos de l são

$$\boxed{j_0(\rho) = \frac{\operatorname{sen}\rho}{\rho}\ ;\ j_1(\rho) = \frac{\operatorname{sen}\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}\ ;\ j_2(\rho) = \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\operatorname{sen}\rho - \frac{3}{\rho^2}\cos\rho\ ;\ \ldots} \quad (10.66)$$

e, de modo geral,

$$j_l(\rho) = \underbrace{p_{l+1}\left(\frac{1}{\rho}\right)}_{\text{polin. de grau } l+1}\operatorname{sen}\rho + \underbrace{q_{l}\left(\frac{1}{\rho}\right)}_{\text{polin. de grau } l}\cos\rho .$$

Levando em conta as (10.41), (10.46) e o comportamento assimptótico das funções de Bessel, dado por

$$\boxed{J_\lambda(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left[z - \left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right] \quad (|z| \to \infty)} \quad (10.67)$$

vemos que

$$\boxed{j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, J_{l+\frac{1}{2}}(z)} \quad (10.68)$$

Justifica o nome "funções esféricas de Bessel"

De fato, isto dá, pela (10.67)

$$j_l(z) \approx \frac{1}{z}\cos\left[z - (l+1)\frac{\pi}{2}\right] = \frac{\operatorname{sen}\left(z - l\frac{\pi}{2}\right)}{z} \quad (\equiv (10.61))$$

As autofunções simultâneas de $\hat{H}_0$, $\hat{l}^2$ e $\hat{l}_z$, com

$$\boxed{\begin{aligned} &\hat{H}_0|k,l,m\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m}|k,l,m\rangle = E|k,l,m\rangle = \frac{\hbar^2k^2}{2m}|k,l,m\rangle \\ &\hat{l}^2|k,l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|k,l,m\rangle\ ;\ \hat{l}_z|k,l,m\rangle = \hbar m|k,l,m\rangle \end{aligned}} \quad (10.69)$$

são dadas por (estados estac. da partíc. livre)

$$\boxed{\langle r,\theta,\varphi|k,l,m\rangle = \Phi_{\vec{k}lm}(r,\theta,\varphi) = N_l\, j_l(kr)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)} \quad (10.70)$$

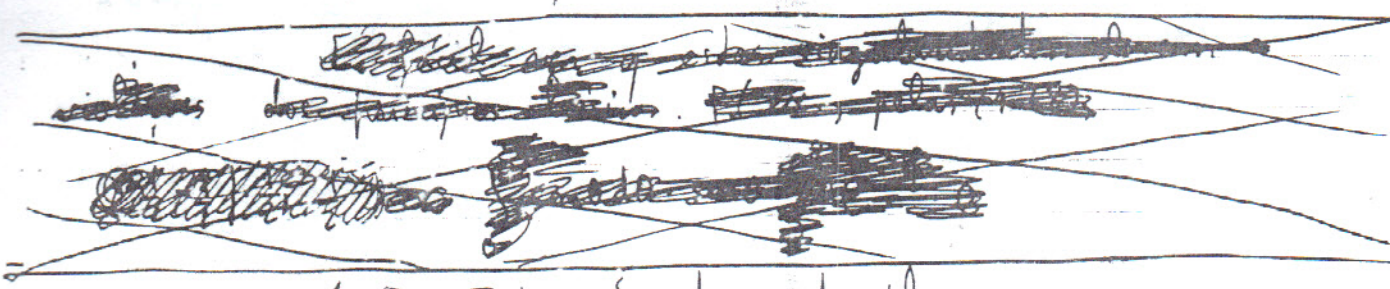
$\vec{k} = \vec{p}/\hbar$

Em partíc. p/ $l=0$,

$$\boxed{\Phi_{k00} \propto \frac{\operatorname{sen}(kr)}{r}} \quad (10.71)$$

que é o autoestado de partíc. livre discutido no Probl. 27. Como foi visto lá, é sol. da eq. de Schröd. livre e pode ser representado como superpos. de ondas planas em todas as direções

autoestados de $\hat{E}$



10.5 · Expansão da onda plana

Reciprocamente, deve ser possível expandir uma onda plana em harmônicos esféricos. Em particular, se tomarmos uma onda plana na direção z

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} \qquad (10.72)$$

o resultado só pode depender de $Y_{\ell 0} \propto P_\ell(\cos\theta)$, pq. é indep. de φ, ou seja, devemos ter (cf. (10.70) c/ $m=0$).

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell \, j_\ell(kr) \, P_\ell(\cos\theta) \qquad (10.73)$$

Mas, p/ r fixo, esta é 1 exp. de uma função $f(\theta)$ em polinômios de Legendre. Logo, pela (9.104), devemos ter

$$c_\ell \, j_\ell(kr) = \left(\frac{2\ell+1}{2}\right) \int_0^\pi P_\ell(\cos\theta)\, e^{ikr\cos\theta}\, \operatorname{sen}\theta \, d\theta \qquad (10.74)$$

ou seja,

$$c_\ell \, j_\ell(\rho) = \left(\frac{2\ell+1}{2}\right) \int_{-1}^{1} P_\ell(x)\, e^{i\rho x}\, dx \qquad (10.75)$$

P/ determinar o valor de c_ℓ, notemos que as expansões assintóticas dos 2 membros devem ser idênticas p/ $\rho \to \infty$. Pela (10.61), isto dá

$$c_\ell \cdot \frac{\operatorname{sen}(\rho - \ell\frac{\pi}{2})}{\rho} \approx \left(\frac{2\ell+1}{2}\right) \int_{-1}^{1} P_\ell(x)\, e^{i\rho x}\, dx \quad (\rho \to \infty) \qquad (10.76)$$

O comportamento assintótico do 2º membro p/ $\rho \to \infty$ obtém-se integrando por partes:

$$e^{i\rho x} = \frac{d}{dx}\left(\frac{e^{i\rho x}}{i\rho}\right) \qquad (10.77)$$

$$\int_{-1}^{1} P_\ell(x)\, e^{i\rho x}\, dx = \frac{e^{i\rho x}}{i\rho} P_\ell(x)\Big|_{-1}^{1} - \underbrace{\frac{1}{i\rho}\int_{-1}^{1} e^{i\rho x}\frac{dP_\ell}{dx}\,dx}_{=\mathcal{O}\left(\frac{1}{\rho^2}\right)}$$

após nova integração por partes, ∴ desprezível

$$= \frac{1}{i\rho}\Big[e^{i\rho}\underbrace{P_\ell(1)}_{=1} - e^{-i\rho}\underbrace{P_\ell(-1)}_{=(-)^\ell = e^{i\pi\ell}}\Big] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\rho^2}\right)$$

$$= \frac{e^{i\ell\frac{\pi}{2}}}{\rho}\left[\frac{e^{i(\rho-\ell\frac{\pi}{2})} - e^{-i(\rho-\ell\frac{\pi}{2})}}{i}\right] + \mathcal{O}(\rho^{-2}) = \frac{2}{\rho}\left(e^{i\pi/2}\right)^\ell \operatorname{sen}\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right) + \mathcal{O}(\rho^{-2})$$

∴

$$\boxed{\int_{-1}^{1} P_\ell(x)\, e^{i\rho x}\, dx = \frac{2}{\rho}\, i^\ell \operatorname{sen}\left(\rho - \frac{\ell\pi}{2}\right) + \mathcal{O}(\rho^{-2}) \quad (\rho \to \infty)} \qquad (10.78)$$

e, comparando com a (10.76),

$$C_\ell \frac{\operatorname{sen}(\rho - \ell\frac{\pi}{2})}{\rho} \approx \frac{(2\ell+1)}{2}\cdot 2\, i^\ell \frac{\operatorname{sen}(\rho - \ell\frac{\pi}{2})}{\rho}$$

o que dá

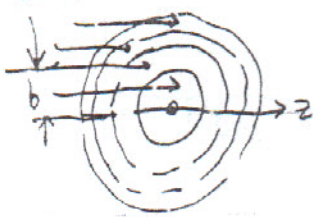
$$\boxed{C_\ell = (2\ell+1)\, i^\ell} \qquad (10.79)$$

e, finalmte, a expansão desejada:

$$\boxed{e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1)\, i^\ell\, j_\ell(kr)\, P_\ell(\cos\theta)} \qquad (10.80)$$

q é um resultado importante, particularmte em teoria do espalhamto, conforme veremos depois.

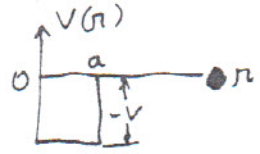
A (10.65) mostra q 1 onda plana (auto-est. de $\hat{p}$) pode ser representada como superposição de estados correspondentes a todos os momentos angulares orbitais possíveis, de $\ell = 0$ a $\ell \to \infty$. De fato, se interpretarmos a onda plana em termos de 1 feixe uniforme de partícs. c/ mmo. momento $\hbar k\hat{z}$, elas podem ter ∀ parâmetro de impacto b em rel. ao eixo (fig.).



10.6. Poço de potencial quadrado 3-D

E' o pot.

$$V(r) = \begin{cases} -V & (r<a) \\ 0 & (r>a) \end{cases} \qquad (10.81)$$

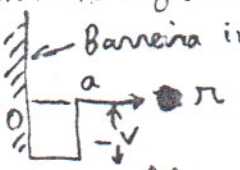


Vamos-nos limitar a discutir os estados ligados cl momento $\ell = 0$ (ondas s) neste pot.

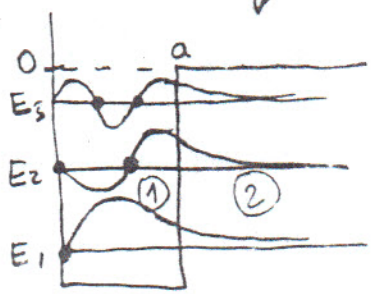
Pela (10.27), p/ $\ell = 0$,

$$U_0(r) = V(r) \qquad (10.82)$$

cl a cond. de contorno $u_0(0) = 0$ (cf. (10.35)), ou seja, $u_0(r) = r R_0(r)$ é sol. da eq. de Schröd. 1-D p/ 1 poço quadrado cl 1 barreira impenetrável na origem, q obriga a função de onda a se anular p/ $r = 0$.



Mas estes são precisam. os estados ligados ímpares obtidos no Probl. 2.5, cl a ≠ça de notação $a/2 \longrightarrow a$. A fig. mostra a disc. qualitativa dos níveis de energia e funções de onda corresps. (o nº de nodos vai crescendo).



$$\phi_1 = A \frac{\operatorname{sen}(kr)}{r} \quad (0 \leq r \leq a)$$
$$\phi_2 = A' \frac{e^{-\kappa r}}{r} \quad (r > a) \qquad (10.83)$$

cl ϕ e $\partial\phi/\partial r$ contínuos em $r = a$.

Vemos q o 1º estado ligado só aparece depois q ϕ_1 tem + de 1/4 de comprim. de onda dentro do poço (ao contrário do caso 1-D, onde sempre ∃ estado ligado par). Cl isto, a partíc. fica localizada, cl

$$|\Delta r| \lesssim a.$$

Pelo princ. de incerteza, isto $\Rightarrow |\Delta p| \gtrsim \hbar/a$, ou seja, $\frac{(\Delta p)^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2ma^2}$. Logo, a energia de ligação $-V$ tem de ser tal que

$$-V + \frac{(\Delta p)^2}{2m} < 0 \quad \left\{ \quad V \gtrsim \frac{\hbar^2}{2ma^2} \right. \qquad (10.84)$$

Pelo tratam. anterior (Probl. 2.5), a cond. p/ aparecimento

do 1º estado ligado é

$$V \geq \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \qquad (10.85)$$

o q é consistente cl a (10.84).

O deuteron é 1 estado ligado N+P, cl onda S (singlet) energia de ligação mto. pequena (~ 2,2 MeV) comparada cl a profundidade V do "poço quadrado equivalente" das forças nucleares, o q corresponde ≈ de à situação em que apenas acabou de aparecer o 1º estado ligado. A massa m neste caso, conforme veremos logo, é a massa reduzida do sistema de 2 corpos, $m \approx M_p/2$ (M_p = massa do próton ≈ M_N = massa do nêutron).

Probl. 43. (a) Verifique a (10.85).

(b) Estime V para as forças nucleares, sabendo que o alcance a ~ 2 ■ x 10^{-13} cm e que V é pouco mais que suf^te p/ ligar o deuteron. (V ≥ 25 MeV).

Probl. 44. Obtenha os níveis de energia e a correspondente degenerescência para ~~excitados~~ $\ell = 0$ e $\ell = 1$ de uma partícula numa caixa esférica de ~~paredes~~ raio a e paredes impenetráveis.

9ª aula — 6-4

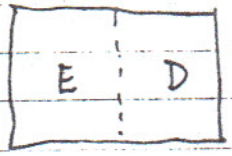
aula (18/11/92)

11. O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO

11.1. MQ p/ 1 sistema de partículas

Até agora só formulamos a MQ p/ 1 única partícula num campo de forças externas. O átomo de H é 1 sist. de 2 partíc. (e + p), de modo q precisamos generalizar a formulação da MQ p/ 1 sist. de N partículas, $N > 1$.

À 1ª vista, poderia parecer suf. descrever o sistema através de várias distribs. de probabilidade, uma p/ cada partícula. Entretanto, isto n é suf. C/ efeito, se tomarmos p/ simplificar 2 partíc., 1 e 2, numa caixa, podemos imaginar a caixa dividida em 2 metades, E (esquerda) e D (direita), e a descrição cogitada diria qual é a probab. de encontrar a partíc. 1 em E ($P_E(1)$) ou D ($P_D(1)$), e o mesmo p/ 2: $P_E(2)$, $P_D(2)$. Mas isto ainda n diz nada sobre a probab. de q ambas as partículas estejam juntas (em E ou D), ou de que se encontrem em metades ≠s da caixa, ou seja, n descreve as correlações entre as posições simultâneas das 2 partíc. [P/ ex., se elas são carregadas e têm cargas de mesmo sinal ou sinais opostos, tenderão a ficar separadas (repulsão) ou juntas (atração)]. P/ 1 descrição completa, precisamos de 1 distrib. de probab. do tipo $P(1, 2)$, q defenda simultaneam. das posições das 2 partículas [Nota: estamos supondo q as partíc. são distinguíveis, como e^- e p^+, de modo q podemos saber qual delas está de que lado].



Passando de 1 caixa a elementos de volume infinitésimos, a grandeza básica na descrição seria a probab. de encontrar simultaneam., no instante t, a partíc. 1 num elem. de vol. d^3r_1 em torno de $\underset{\sim}{r}_1$ e a partíc. 2 " " d^3r_2 " " $\underset{\sim}{r}_2$:

$$\underbrace{P(\underset{\sim}{r}_1, \underset{\sim}{r}_2, t)}_{\text{Dens. de probab.}} \cdot d^3r_1\, d^3r_2 \qquad (11.1)$$

Seria $\int P(\underset{\sim}{r}_1, \underset{\sim}{r}_2, t)\, d^3\underset{\sim}{r}_2 = P_1(\underset{\sim}{r}_1, t) \underbrace{\int P_2(\underset{\sim}{r}_2, t)\, d^3\underset{\sim}{r}_2}_{=1}$

$\therefore \quad = P_1(\underset{\sim}{r}_1, t)$

normalizado por

$$\int d^3r_1 \int d^3r_2\, P(\underset{\sim}{r}_1, \underset{\sim}{r}_2, t) = 1 \qquad (11.2)$$

(estendida a todo o espaço 6-D)

Se as partíc. são independentes, não-correlacionadas, (cada uma fica "na sua")

$$P(\underset{\sim}{r}_1, \underset{\sim}{r}_2, t) = P_1(\underset{\sim}{r}_1, t)\, P_2(\underset{\sim}{r}_2, t) \qquad (11.3)$$

(eventos estocasticamente independentes)

onde cada P_i é separadamente normalizada. Neste caso, a probab. de encontrar a 1ª partíc. num entorno de $\underset{\sim}{r}_1$ é dada por P_1, ou seja, é independente de $\underset{\sim}{r}_2$.

A generaliz básica da MQ, p/ 2 partíc., é dizer q o vetor de estado do sist. de 2 partíc. no inst. t é descrito por uma função de onda $\psi(\underset{\sim}{r}_1, \underset{\sim}{r}_2, t)$ tal que (na represent. de configuração)

$$P(\underset{\sim}{r}_1, \underset{\sim}{r}_2, t) = |\psi(\underset{\sim}{r}_1, \underset{\sim}{r}_2, t)|^2 \qquad (11.4)$$

(ψ = amplitude (complexa) de densidade de probabilidade)

cf a cond. de normalização (11.2). P/ partíc. independentes (e distinguíveis),

$$\psi(\underset{\sim}{r}_1, \underset{\sim}{r}_2, t) = \psi_1(\underset{\sim}{r}_1, t) \cdot \psi_2(\underset{\sim}{r}_2, t) \qquad (11.6')$$

ou seja, a função de onda se decompõe num produto.

A eq. de Schrödinger p/ 2 partíc. se escreve

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \qquad (11.7)$$

onde $\hat{H}$ opera sobre as 2 partíc. (P/ partíc. indepts. i.e. no caso da (11.6),

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi_2 \underbrace{i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t}}_{=\hat{H}_1\psi_1} + \psi_1 \underbrace{i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t}}_{=\hat{H}_2\psi_2}$$

$$= (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi_1\psi_2 = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi \qquad (11.8)$$

e vice-versa, ou seja, dizer q as 2 partíc. são

independentes equivale a dizer que (não há energia de interação)

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad (11.9)$$

(Energia total do sist. = soma das energias)

onde $\hat{H}_1$ opera somente sobre a partíc. 1 e $\hat{H}_2$ somente sobre a partíc. 2.

Isto vale, p/ ex., p/ 1 sist. de 2 partículas livres, c/

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2$$
$$\hat{H}_2 = \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} = -\frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 \quad (11.10)$$

$$\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \quad (i = 1, 2)$$

Entretanto, deixa de valer se ∃ uma interação entre as 2 partíc., p/ ex., interação Coulombiana

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{q_1 q_2}{r_{12}} = \frac{q_1 q_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (11.11)$$

q_i = carga da partíc. i (unidades CGS)

Neste caso (q é o do átomo de H), teremos

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_1}_{\vec{r}_1} + \underbrace{\hat{H}_2}_{\vec{r}_2} + \hat{V}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (11.12)$$

e a (11.6) não é + solução da eq. de Schröd., q toma a forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2\psi + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\psi \quad (11.13)$$

q é 1 eq. a derivs. parciais em 7 variáveis indeps. $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$. P/ estados estacionários do sistema, c/

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi, \quad (11.14)$$

a (11.13) é 1 eq. do tipo eq. de ondas num espaço de configurações 6-D (p/ N partículas, de dimensão 3N), mostrando q as "ondas de probabilidade" de Schrödinger têm 1 caráter abstrato, propagando-se num espaço 3N-D, q só se reduz ao espaço ordinário p/ N = 1.

[Observ. histórica sobre as "ondas piloto" de de Broglie]

Todos estes resultados se generalizam facilmente a sistemas de N partículas, $\forall N$.

11.2. Coords. do CM e coords. relativas

(a) Mec. Clássica

Consideremos 1 sist. de 2 partículas q interagem c/ forças centrais, ou seja, $V = V(|\underset{\sim}{r}_1 - \underset{\sim}{r}_2|)$. A energia total é

$$E = \frac{\underset{\sim}{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\underset{\sim}{p}_2^2}{2m_2} + V(|\underset{\sim}{r}_1 - \underset{\sim}{r}_2|), \quad (11.15)$$

com

$$\underset{\sim}{p}_1 = m_1 \dot{\underset{\sim}{r}}_1, \quad \underset{\sim}{p}_2 = m_2 \dot{\underset{\sim}{r}}_2 \quad (11.16)$$

e as eqs. de movto

$$\left.\begin{aligned} \dot{\underset{\sim}{p}}_1 &= -\nabla_1 V \\ \dot{\underset{\sim}{p}}_2 &= -\nabla_2 V = +\nabla_1 V \end{aligned}\right\} \quad \dot{\underset{\sim}{p}}_1 + \dot{\underset{\sim}{p}}_2 = \frac{d\underset{\sim}{P}}{dt} = 0 \quad (11.17)$$

$= \dot{\underset{\sim}{P}}$

onde

$$\underset{\sim}{P} = \underset{\sim}{p}_1 + \underset{\sim}{p}_2 = m_1 \dot{\underset{\sim}{r}}_1 + m_2 \dot{\underset{\sim}{r}}_2 \quad (11.18)$$

é o momento total do sist., q é conservado

Podemos escrever

$$\underset{\sim}{P} = M \dot{\underset{\sim}{R}} \quad (11.19) \qquad \Rightarrow \ddot{\underset{\sim}{R}} = 0$$

onde

$$M \equiv m_1 + m_2 \quad (11.20)$$

é a massa total do sist., e

$$\underset{\sim}{R} \equiv \frac{m_1 \underset{\sim}{r}_1 + m_2 \underset{\sim}{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (11.21)$$

é a posição do CM (centro de massa) do sist. Pela (11.17), o CM se move c/ MRU, de modo q o referencial do CM é 1 referencial inercial.

Em rel. a este referencial, as posições das 2 partíc. são

$$\boxed{\begin{aligned}\underset{\sim}{r}'_1 &= \underset{\sim}{r}_1 - \underset{\sim}{R} = \frac{m_2}{m_1+m_2}(\underset{\sim}{r}_1 - \underset{\sim}{r}_2)\\ \underset{\sim}{r}'_2 &= \underset{\sim}{r}_2 - \underset{\sim}{R} = -\frac{m_1}{m_1+m_2}(\underset{\sim}{r}_1 - \underset{\sim}{r}_2)\end{aligned}} \quad (11.22)$$

ou seja, introduzindo a posição relativa

$$\boxed{\underset{\sim}{r} \equiv \underset{\sim}{r}_1 - \underset{\sim}{r}_2,} \quad (11.23)$$

$$\underset{\sim}{r}'_1 - \underset{\sim}{r}'_2 = \underset{\sim}{r} = \underset{\sim}{r}'$$

$$\boxed{\underset{\sim}{r}'_1 = \frac{m_2}{M}\underset{\sim}{r} \quad ; \quad \underset{\sim}{r}'_2 = -\frac{m_1}{M}\underset{\sim}{r}} \quad (11.24) \Rightarrow \boxed{m_1\underset{\sim}{r}'_1 + m_2\underset{\sim}{r}'_2 = 0}$$

$$\underset{\sim}{p}_1 = m_1\dot{\underset{\sim}{r}}_1 = m_1(\dot{\underset{\sim}{r}}'_1 + \dot{\underset{\sim}{R}}) = \frac{m_1m_2}{M}\dot{\underset{\sim}{r}} + m_1\dot{\underset{\sim}{R}}$$

$$\underset{\sim}{p}_2 = m_2\dot{\underset{\sim}{r}}_2 = m_2(\dot{\underset{\sim}{r}}'_2 + \dot{\underset{\sim}{R}}) = -\frac{m_1m_2}{M}\dot{\underset{\sim}{r}} + m_2\dot{\underset{\sim}{R}}$$

$$\boxed{\frac{m_1m_2}{m_1+m_2} = \mu = \text{massa reduzida} \quad \left(\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)} \quad (11.25)$$

$$\boxed{\underset{\sim}{p}_1 = \mu\dot{\underset{\sim}{r}} + m_1\dot{\underset{\sim}{R}}\ , \quad \underset{\sim}{p}_2 = -\mu\dot{\underset{\sim}{r}} + m_2\dot{\underset{\sim}{R}}} \quad (11.26)$$

Como $\ddot{\underset{\sim}{R}} = 0$ pela (11.17), as eqs. de movº (11.17) se reduzem a

$\nabla_1 = \nabla$, $\nabla_2 = -\nabla$, $\nabla = \frac{\partial}{\partial r}\hat{r}$

$$\boxed{\mu\ddot{\underset{\sim}{r}} = -\nabla V(|\underset{\sim}{r}|)} \quad (11.27)$$

↑ movº de 1 partíc. em rel. à outra (ou ao CM)

q ≡ à eq. de movº de 1 partícula única ("partíc. relativa") de posição $\underset{\sim}{r}$ e massa = à massa reduzida no campo de forças centrais de potencial $V(|\underset{\sim}{r}|)$

$$T_1 = \frac{p_1^2}{2m_1} = \frac{\mu^2\dot{r}^2}{2m_1} + \mu\dot{\underset{\sim}{r}}\cdot\dot{\underset{\sim}{R}} + \frac{1}{2}m_1\dot{R}^2$$

$$T_2 = \frac{p^2}{2m_2} = \frac{\mu^2\dot{r}^2}{2m_2} - \mu\dot{\underset{\sim}{r}}\cdot\dot{\underset{\sim}{R}} + \frac{1}{2}m_2\dot{R}^2$$

$$\Rightarrow \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{\mu^2}{2}\underbrace{\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)}_{\frac{1}{\mu}}\dot{r}^2 + \frac{1}{2}(m_1+m_2)\dot{R}^2$$

$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{\mu}{2}\dot{\underset{\sim}{r}}^2 + \frac{M}{2}\dot{\underset{\sim}{R}}^2 \qquad (11.28)$$

En. cinét. da "partíc. relativa" — En. cinét. do CM

$$E = \frac{\mu}{2}\dot{\underset{\sim}{r}}^2 + V(r) + \frac{M}{2}\dot{\underset{\sim}{R}}^2 \qquad (11.29)$$

$\frac{P^2}{2M}$

mov^to relativo — mov^to do CM — independentes

(b) MQ

$\underset{\sim}{R} \equiv (X, Y, Z)$

$\underset{\sim}{r} \equiv (x, y, z)$

$$X = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{M} \qquad x = x_1 - x_2 \leftarrow \text{idem } \mu \text{ e } \underset{\sim}{r} \qquad (11.30)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_1} = \frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2} = \frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial x_2} = \frac{m_2}{M}\frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{1}{m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{1}{m_1}\left(\frac{m_1^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + 2\frac{m_1}{M}\frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)$$

$$\frac{1}{m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{1}{m_2}\left(\frac{m_2^2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2\frac{m_2}{M}\frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)$$

$$\frac{1}{m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{m_1+m_2}{M^2}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\frac{1}{m_1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{1}{M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{1}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad (11.31)$$

6 q dá

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2_{\underset{\sim}{R}}}_{\hat{H}_{\underset{\sim}{R}}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2_{\underset{\sim}{r}} + V(|\underset{\sim}{r}|) = \hat{H}_{\underset{\sim}{R}} + \hat{H}_{\underset{\sim}{r}} \qquad (11.32)$$

onde $\hat{H}_R$ é a Hamiltoniana de 1 partíc. (CM) livre de
massa M e $\hat{H}_{\underset{\sim}{r}}$ " " (relativa) de posição

$\underset{\sim}{r}$ e massa μ no campo de forças centrais de potencial $\hat{V}(|\underset{\sim}{r}|)$. Comparando d a (11.9), somos levados a procurar 1 sol. dipo produto,

$$\boxed{\psi(\underset{\sim}{r}_1, \underset{\sim}{r}_2, t) \equiv \psi_1(\underset{\sim}{R}, t)\, \psi_2(\underset{\sim}{r}, t)} \quad (11.33)$$

(5)

o q dá

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \left(\frac{\partial \psi_1}{\partial t} \psi_2 + \frac{\partial \psi_2}{\partial t} \psi_1 \right) \Big\} \longrightarrow$$

$$\hat{H}\psi = \psi_2 \hat{H}_R \psi_1 + \psi_1 \hat{H}_{\underset{\sim}{r}} \psi_2$$

$$\Rightarrow i\hbar \left(\psi_2 \frac{\partial \psi_1}{\partial t} + \psi_1 \frac{\partial \psi_2}{\partial t} \right) = \psi_2 \hat{H}_R \psi_1 + \psi_1 \hat{H}_{\underset{\sim}{r}} \psi_2$$

$\therefore$, dividindo por $\psi_1 \psi_2$,

$$\boxed{\frac{1}{\psi_1}\left(i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} - \hat{H}_{\underset{\sim}{R}} \psi_1 \right) = -\frac{1}{\psi_2}\left(i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} - \hat{H}_{\underset{\sim}{r}} \psi_2 \right)} \quad (11.34)$$

↑ função só de $\underset{\sim}{R}, t$ — função só de $\underset{\sim}{r}, t$

o q é satisfeito por

Estados estac.

$\hat{H}_R \psi_1 = \frac{P^2}{2M}\psi_1$; $i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \hat{H}_{\underset{\sim}{R}} \psi_1$ ← eq. de partíc. livre (CM) (11.35)

$\hat{H}_{\underset{\sim}{r}} \psi_2 = E_n \psi_2$; $i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \hat{H}_{\underset{\sim}{r}} \psi_2$ ← eq. p/ a "partíc. relativa". (11.36)

$E = \frac{P^2}{2M} + E_n$

O probl. de 2 corpos se reduz assim ao probl. de 1 só partíc. num cpo. de forças centrais

11.3. O átomo de H

É o sist. formado por 1 e ligado a 1 p.

Sist. CGS gaussiano

$$\left.\begin{aligned} m_e &= 9{,}1 \times 10^{-28}\ g \\ m_p &= 1{,}7 \times 10^{-24}\ g \\ &= 1.8 \times 10^3 m_e \end{aligned}\right\} \quad \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_p}} \approx m_e\left(1 - \underbrace{\frac{m_e}{m_p}}_{\sim 5\times 10^{-4}}\right) \quad (11.37)$$

$$\boxed{V = -\frac{e^2}{r}} \quad (11.38) \qquad \boxed{e = 4{,}8 \times 10^{-10}\ u.e.s.}$$

Se substituirmos

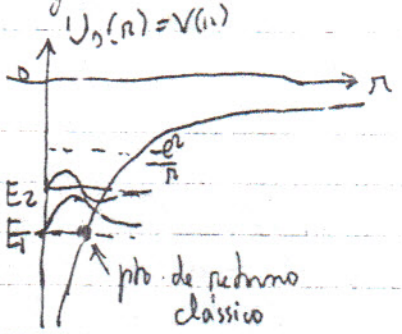
$$e^2 \longrightarrow Ze^2 \qquad (11.39)$$

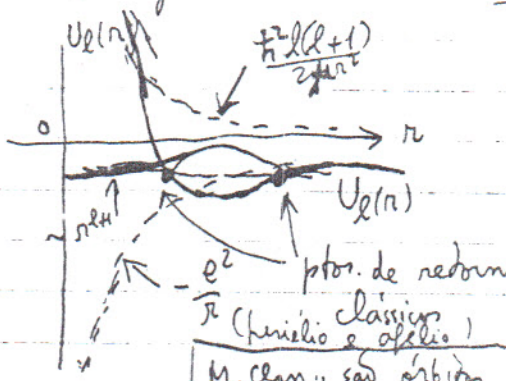
os results se aplicam aos íons hidrogenoides (1 elétron ligado a 1 núcleo de carga Ze: He^+, Li^{++}, ...

Potencial efetivo

$$U_\ell(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \qquad (11.40)$$

Para $\ell \neq 0$, o pot. Coulombiano predomina p/ $r \to \infty$ e o centrífugo p/ $r \to 0$. Desejamos obter os estados ligados, ou seja, c/ $E < 0$





P/ $E > 0$, dem-se um espectro contínuo (movto clássico ilimitado) q representa os estados de espalhamento de e^- pelo p (em M clássica, são órbitas hiperbólicas)

Os níveis de energia ligados darão um espectro discreto e só podem depender de ℓ ($\bar{n}$ de n): $E_{n\ell}$.

Funções de onda:

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi,t) = \frac{u_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\, e^{-iE_{n\ell}t/\hbar} \qquad (11.41)$$

$\ell = 0, 1, 2, \ldots$

onde

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2 u_{n\ell}}{dr^2} - \frac{e^2}{r} u_{n\ell} + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\ell(\ell+1) u_{n\ell} = E_{n\ell}\, u_{n\ell} \qquad (11.42)$$

com

$$u_{n\ell}(0) = 0 \qquad (11.43) \qquad \left[u_{n\ell}(r) \sim r^{\ell+1} \ (r \to 0)\right]$$

e

$$\int_0^\infty u_{n\ell}^2(r)\, dr = 1 \qquad (11.44)$$

(normalizabilidade)

É conveniente reescrever a (11.42) (omitindo os índices n, ℓ) como

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 r}\mu - \frac{l(l+1)}{r^2}u + \frac{2\mu}{\hbar^2}E\,u = 0$$

$\frac{2\mu e^2}{\hbar^2 r}$: Dimensão de $[L]^{-2}$

Seja

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\kappa^2 \qquad (11.45)$$

$\hbar = 1{,}05 \times 10^{-27}$ ergs
$\mu = 9{,}1 \times 10^{-28}$ g
$e = 4{,}8 \times 10^{-10}$ ues

$$a_0 \approx \frac{1{,}1 \times 10^{-54}}{9{,}1 \times 10^{-28} \times 2{,}3 \times 10^{-19}} \approx \frac{11}{21} \times 10^{-8}\ \text{cm} \approx 0{,}52\,\text{Å}$$

e

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \approx 0{,}52 \times 10^{-8}\ \text{cm} = 0{,}52\,\text{Å} \qquad (11.46)$$

= raio de Bohr (veremos depois porque)

↑ DEFINE a escala atômica

20ª aula 24/10/91

Então,

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left(\frac{2}{a_0 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \kappa^2\right)u = 0 \qquad (11.47)$$

23ª aula 8-6-84

11.4. O método da série de potências

Vamos resolver a (11.47) por um método análogo ao método direto que foi empregado no caso do oscilador harmônico.

Comportamento assintótico p/ $r \to \infty$:

Deve ser dominado por

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \kappa^2 u = 0 \quad \Rightarrow \quad u(r) \sim e^{\pm \kappa r} \quad (r \to \infty) \qquad (11.48)$$

↑ Dominado por

onde o sinal + deve ser excluído. Fazemos ∴ a mudança de variável

$$u(r) = e^{-\kappa r} f(r) \qquad (11.49)$$

onde

$$f(0) = 0 \qquad (11.50)$$

e

$$f(r) \ \underline{\text{NÃO}} \text{ deve ser dominado por } e^{+2\kappa r} \text{ p/ } r \to \infty \qquad (11.51)$$

} Condições de contorno

$$\frac{du}{dr} = e^{-kr}\frac{df}{dr} - k e^{-kr} f$$

$$\frac{d^2u}{dr^2} = e^{-kr}\frac{d^2f}{dr^2} - 2k e^{-kr}\frac{df}{dr} + \underbrace{k^2 e^{-kr} f}_{k^2 u}$$

$$\frac{d^2u}{dr^2} - k^2 u = e^{-kr}\left(\frac{d^2f}{dr^2} - 2k\frac{df}{dr}\right) =$$

$$= \left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2}{a_0 r}\right) e^{-kr} f$$

Sejam distância em unidades do raio de Bohr

$$\boxed{\frac{r}{a_0} \equiv \rho, \quad \chi \equiv k a_0} \quad (11.51a) \quad \text{(adimensionais)}$$

$e^{2kr} = e^{2\chi\rho}$ ↑ deve ser excluído no comport. assint.

$$\boxed{\frac{d^2f}{d\rho^2} - 2\chi\frac{df}{d\rho} + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] f = 0} \quad (11.52)$$

c/ as cond. de contorno (11.51).

Neste caso, ao contrário do oscil. harmônico, temos 1 singularidade p/ $\rho \to 0$ nos coeficientes, de modo q não podemos excluir 1 singular. na solução $f(r)$! ∴, em lugar de 1 simples série de potências, procuramos 1 sol. da forma

$$\boxed{f(\rho) = \rho^s \sum_{m=0}^{\infty} a_m \rho^m} \quad (11.53) \quad \text{(melhor usar j)}$$

aula (23/11/92)

onde s poderia ser < 0 (em princípio). Aliás, como o pot. centrífugo domina o Coulombiano p/ $\rho \to 0$, esperamos, pela (10.30), 1 comportamento do tipo

$$\boxed{f(\rho) \approx A_\ell \rho^{\ell+1} + B_\ell \rho^{-\ell} \quad (\rho \to 0),} \quad (11.54)$$

onde o termo em $\rho^{-\ell}$ seria singular em $\rho = 0$ p/ $\ell \geq 1$. ↑

Substituindo na (11.52),

$$f(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^{m+s}$$ (Mas deverá ser excluído)

$$\frac{df}{d\rho} = \sum_{m=0}^{\infty} (m+s) c_m \rho^{m+s-1}$$

$$\frac{d^2f}{d\rho^2} = \sum_{m=0}^{\infty} (m+s)(m+s-1) c_n \rho^{m+s-2}$$

Substituindo na (11.52),

$$0 = \sum_{m=0}^{\infty} (m+s)(m+s-1)\, c_m \rho^{m+s-2} - l(l+1)\sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^{m+s-2} \quad \leftarrow \text{separamos } m=0$$

$$-2\chi \sum_{m=0}^{\infty} (m+s)\, c_m \rho^{m+s-1} + \frac{2}{\rho}\sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^{m+s-1} \quad \text{e fazemos } m = m'+1 \text{ no resto } (m' \geq 0)$$

$$= s(s-1)c_0 \rho^{s-2} - l(l+1)c_0 \rho^{s-2} +$$

$$+ \sum_{m'=0}^{\infty} (m'+1+s)(m'+s)\, c_{m'+1} \rho^{m'+s-1} - l(l+1)\sum_{m'=0}^{\infty} c_{m'+1} \rho^{m'+s-1}$$

$$+ 2\sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{1}{\rho} - (m+s)\chi\right] c_m \rho^{m+s-1}$$

ou seja,

$$0 = \left[s(s-1) - l(l+1)\right] c_0 \rho^{s-2} + \sum_{m=0}^{\infty} \left\{ \left[(m+s)(m+s+1) - l(l+1)\right] c_{m+1} - 2\left[\chi(m+s) - \frac{1}{\rho}\right] c_m \right\} \rho^{m+s-1} \tag{11.55}$$

$\forall \rho$, $\therefore$ todos os coefs. têm de ser $\equiv 0$:

$$\boxed{\begin{aligned} &\left[s(s-1) - l(l+1)\right] c_0 = 0 \\ &\frac{c_{m+1}}{c_m} = \frac{2\left[\chi(m+s) - \frac{1}{\rho}\right]}{(m+s)(m+s+1) - l(l+1)} \qquad (m = 0, 1, 2, \ldots) \end{aligned}} \tag{11.56}$$

Pela rel. de recorrência, se fôr $c_0 = 0$, todos os $c_m \equiv 0$, $\therefore f \equiv 0$. Logo, tem de ser $c_0 \neq 0$, o q dá a "eq. indicial"

$$\boxed{s(s-1) = l(l+1), \text{ cl as sols. } \begin{cases} s = l+1 \\ s = -l \end{cases}} \tag{11.57}$$

(eq. do 2º grau, $\therefore$ 2 raízes)

concordando cl a (11.54).

Pela cond. de contorno (11.50), só é aceitável a sol. regular

$$\boxed{s = l+1} \tag{11.58}$$

que dá

$$\boxed{\frac{c_{m+1}}{c_m} = \frac{2\left[\chi(m+l+1) - 1\right]}{(m+l+1)(m+l+2) - l(l+1)} \qquad (m = 0, 1, 2, \ldots)} \tag{11.59}$$

cl c_0 a ser definido pela cond. de normalização.

Comportamento p/ $m \to \infty$:

$$\boxed{\frac{c_{m+1}}{c_m} \approx \frac{2\chi}{m} \quad (m \to \infty)} \quad (11.60)$$

Mas este é exatamente o comportamento dos coefs. da exp. em série de potências de $e^{2\chi\rho} = e^{2\chi a_0 \cdot n/a_0} = e^{2\chi n}$

$$\boxed{e^{2\chi\rho} = \sum_{m=0}^{\infty} d_m \rho^m, \quad d_m = \frac{(2\chi a_0)^m}{m!}} \quad (11.61)$$

o q dá

$$\boxed{\frac{d_{m+1}}{d_m} = \frac{2\chi}{m+1} \approx \frac{2\chi}{m} \quad (m \to \infty)} \quad (11.62)$$

Logo, a menos q a série termine (polinômio), teremos

$$\boxed{f(\rho) \underset{\text{dominado por}}{\gg} e^{2\chi\rho} \quad (\rho \to \infty)} \quad (11.63)$$

que contradiria a cond. de contorno (11.51).

11.5. Autovalores e autofunções do át. de H

P/ q a série termine, tem de ∃r um inteiro $m = N \geq 0$ tal que o numerador da (11.59) se anule, ou seja,

$$\boxed{K a_{N\ell} = \chi_{N\ell} = \frac{1}{N+\ell+1}} \quad (11.64)$$

Neste caso, o último coef. $\neq 0$ na (11.53) é $-c_N$, ou seja,

$$\boxed{f(\rho) = \rho^{\ell+1} \sum_{m=0}^{N} c_m \rho^m} \quad (11.65)$$

Polinômio de grau $N+\ell+1$

e a função radial é da forma (cf. (11.49))

$$\boxed{R(\rho) = \frac{u(\rho)}{\rho} = e^{-\chi\rho} \rho^{\ell} \sum_{m=0}^{N} c_m \rho^m} \quad (11.66)$$

Polin. de grau $N+\ell$.

Pela (11.45),

$$E_{Nl} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} K_{Nl}^2 \qquad (11.67)$$

mas vemos pela (11.64) q o resultado só depende do inteiro

$$n = N + l + 1 \qquad (11.68)$$

$\equiv$ nº quântico principal ($n = 1, 2, 3, \ldots$)

compatível c/ $\pm s$ valores de N e l q dão o mesmo N+l

Como $l \geq 0$, $N \geq 0$, temos $n \geq 1$

$$K_n = \frac{1}{n a_0} \equiv \chi_n = \frac{1}{n} \qquad (11.68)$$

e a (11.68) fica

$$E_n = -\frac{\mathcal{R}}{n^2} \qquad (n = 1, 2, \ldots) \qquad (11.69)$$

onde

$$\mathcal{R} = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{\mu^2 e^4}{\hbar^4} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \qquad (11.70)$$

$$\mathcal{R} \approx \frac{9{,}1\times10^{-28} \times \overbrace{(4{,}8)^4}^{\approx 531} \times 10^{-40}}{2{,}2\times10^{-54}} \text{erg} \approx \frac{4{,}8^3\times10^{65}}{2{,}2\times10^{-54}} \text{erg} \approx 2{,}2\times10^{-11} \text{erg}$$

$1\ \text{eV} \approx 1{,}6\times10^{-12}\ \text{erg}$

$$\Rightarrow \mathcal{R} \approx 13{,}6\ \text{eV} = 1 \text{ unidade Rydberg de energia} \qquad (11.7$$

A (11.69) dá os níveis de energia do átomo de H.

Antes de discutir os resultados, vamos completar o cálculo das autofunções. Os polinômios (11.65) ficam completamente definidos pelas rels de recorrência (11-56) desde q seja dado c_0, o q equivale a dar o fator de normalização. Note que, na (11.65), $f(\rho)$ é um polinômio em ρ de grau n' q satisfaz a (11.52) com $\chi = \chi_n = 1/n$ (cf. (11.68)), ou seja, a eq. diferencial

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} - \frac{2}{n}\frac{df}{d\rho} + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] f = 0 \qquad (11.72)$$

$(n = 1, 2, \ldots\ ;\ l = 0, 1, 2, \ldots$

A outra sol. linear & indep. desta eq. ≠al de 2ª ordem é dominada por $e^{2\chi_n \rho}$ p/ $\rho \to \infty$. Logo, as autofunções são os polinômios g satisfazem a (11.72)

$$\kappa_n r = \chi_n \rho = \frac{r}{n a_0} \equiv \frac{x}{2} \quad \left\{ \boxed{x \equiv \frac{2\rho}{n} = \frac{2r}{n a_0}} \right. \quad (11.73)$$

$\frac{1}{\rho} = \frac{2}{nx}$

$$\frac{d}{d\rho} = \frac{d}{dx}\frac{dx}{d\rho} = \frac{2}{n}\frac{d}{dx}$$

$$\therefore \frac{4}{n^2}\frac{d^2 f}{dx^2} - \frac{4}{n^2}\frac{df}{dx} + \left[\frac{4}{nx} - \frac{4}{n^2 x^2}\ell(\ell+1)\right] f = 0$$

$$\therefore \boxed{\frac{d^2 f}{dx^2} - \frac{df}{dx} + \left[\frac{n}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\right] f = 0} \quad (11.74)$$

Podemos eliminar o potencial centrífugo, como foi feito p/ as funções esféricas de Bessel, pela mud. de variável (cf. (10.50)):

$$\boxed{f_{n\ell}(x) \equiv x^{\ell+1} g_{n\ell}(x)} \quad (11.75)$$

onde $g_{n\ell}$ será 1 polinômio de grau $N = n - (\ell+1)$. (cf. (11.60))

$$\frac{df}{dx} = x^{\ell+1} g' + (\ell+1) x^{\ell} g$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = x^{\ell+1} g'' + 2(\ell+1) x^{\ell} g' + \ell(\ell+1) x^{\ell-2} g$$

$$\therefore 0 = \frac{d^2 f}{dx^2} - \frac{df}{dx} + \left[\frac{n}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\right] f =$$

$$= x^{\ell+1}\left\{ g'' + 2\frac{(\ell+1)}{x} g' + \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} g \right.$$

$$\left. - g' - \left(\frac{\ell+1}{x}\right) g + \frac{n}{x} g - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} g = 0 \right.$$

ou seja,

$$\boxed{g'' + \left[2\frac{(\ell+1)}{x} - 1\right] g' + \left[\frac{n-(\ell+1)}{x}\right] g = 0} \quad (11.76)$$

Esta eq. diferencial já era conhecida na fís. matemát. como " " dos polinômios de Laguerre associados

Polinômios de Laguerre

São definidos por

$$L_n(x) \equiv e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}) \qquad (11.77)$$

derivada de ordem n

Fórmula de Leibnitz

$$\frac{d^n}{dx^n}[u(x)v(x)] = \sum_{p=0}^{n} \binom{n}{p} u^{(p)} v^{(n-p)} \qquad (11.78)$$

$u^{(n-p)}$ $v^{(p)}$

onde

$$\binom{n}{n-p} = \binom{n}{p} = \frac{n!}{p!(n-p)!} \qquad (11.79) = \frac{n(n-1)\cdots(n-p+1)}{1.2\cdots p}$$

$$u = x^n \begin{cases} u^{(p)} = n(n-1)\cdots(n-p+1)\,x^{n-p} = \dfrac{n!}{(n-p)!}x^{n-p} \end{cases}$$

$$V = e^{-x} \begin{cases} V^{(n-p)} = (-)^{n-p} e^{-x} \end{cases}$$

$$u = e^{-x} \begin{cases} u^{(p)} = (-)^p e^{-x} \end{cases}$$

$$V = x^n \begin{cases} V^{(n-p)} = n(n-1)\cdots\underbrace{[n-(n-p)+1]}_{(p+1)}\,x^{n-(n-p)} = \dfrac{n!}{p!}x^p \end{cases} \qquad (11.80)$$

$$L_n(x) = \sum_{p=0}^{n} \frac{n!}{p!}\binom{n}{p}(-)^p x^p \qquad (11.81)$$

Polinômio de grau n em x

Em particular (verifique !)

$$L_0(x) = 1 \quad ; \quad L_1(x) = -x+1 \quad ; \quad L_2(x) = x^2 - 4x + 2 \; ;$$
$$L_3(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6 \qquad (11.82)$$

Para obter uma função geratriz, consideremos

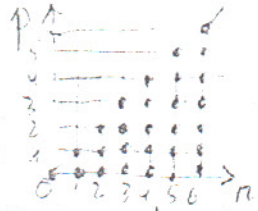
(cf. pg. 151. (8.96))

$$\sum_{n=0}^{\infty} L_n(x)\frac{t^n}{n!} \equiv F(t,x) \qquad (11.83)$$

2.20)

Pela (11.81),

$$F(t;x) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{n} (-)^p \binom{n}{p} \frac{x^p}{p!} t^n \qquad (11.84)$$



Podemos inverter a ordem das duas $\Sigma\Sigma$, notando que, à variação de n, p varia de 0 a ∞, e que, p/ cada p, n assume todos os valores possíveis $\geq p$. Logo,

$$F(t;x) = \sum_{p=0}^{\infty} (-)^p \frac{x^p}{p!} \sum_{n=p}^{\infty} \binom{n}{p} t^n \qquad (11.85)$$

(n varia de p a ∞)

desde que as séries convirjam suf^{te}. bem.

Pela (11.79),

$$\binom{n}{p} = \binom{n}{n-p} \qquad (11.86)$$

Logo, d $n-p = q$. ($\therefore n = p+q$),

$$\sum_{n=p}^{\infty} \binom{n}{p} t^n = t^p \underbrace{\sum_{q=0}^{\infty} \binom{p+q}{q} t^q}_{G(t)} \qquad (11.87)$$

Série binomial:

$$(1+z)^\alpha = 1 + \alpha z + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!} z^2 + \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{3!} z^3 + \cdots \quad (|z|<1)$$

$$\alpha = -p-1 \qquad z = -t$$

(11.88)

$$(1-t)^{-p-1} = \frac{1}{(1-t)^{p+1}} = 1 + (p+1)t + \frac{(p+1)(p+2)}{2!} t^2 + \frac{(p+1)(p+2)(p+3)}{3!} t^3 + \cdots$$

$$= \binom{p}{0} + \binom{p+1}{1} t + \binom{p+2}{2} t^2 + \binom{p+3}{3} t^3 + \cdots \quad (|t|<1)$$

(11.89)

ou seja,

$$\sum_{q=0}^{\infty} \binom{p+q}{q} t^q = \frac{1}{(1-t)^{p+1}} \quad (|t|<1) \qquad (11.90)$$

e a (11.87) fica

$$\boxed{\sum_{r=p}^{\infty} \binom{r}{p} t^r = \frac{t^p}{(1-t)^{p+1}} \quad (|t|<1)} \tag{11.91}$$

Levando na (11.85), vem

$$F(t,x) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-)^p x^p}{p!} \frac{t^p}{(1-t)^{p+1}} = \frac{1}{1-t} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} \left(-\frac{xt}{1-t}\right)^p$$

ou, finalmente, $\forall\, |t|<1$,

$$\boxed{F(t,x) = \frac{1}{1-t} \exp\left(-\frac{xt}{1-t}\right) = \sum_{r=0}^{\infty} L_r(x) \frac{t^r}{r!}} \tag{11.92}$$

Função geratriz dos pols. de Laguerre

Probl. 45. Mostre que

$$\boxed{(1-t)^2 \frac{\partial F}{\partial t} = (1-t-x) F} \tag{11.93}$$

e deduza a rel. de recorrência

$$\boxed{L_{r+1}(x) - (2r+1-x) L_r(x) + r^2 L_{r-1}(x) = 0 \quad (r \geq 1)} \tag{11.94}$$

Probl. 46. Mostre que

$$\boxed{(1-t) \frac{\partial F}{\partial x} = -tF} \tag{11.95}$$

e deduza a relação

$$\boxed{L'_r(x) - r L'_{r-1}(x) = -r L_{r-1}(x)} \tag{11.96} \quad (r \geq 1)$$

Probl. 47. Mostre que as (11.94) e (11.96) implicam

$$\boxed{x L'_r(x) = r L_r(x) - r^2 L_{r-1}(x)} \tag{11.97}$$

levando à equação diferencial dos pols. de Laguerre

$$\boxed{x y'' + (1-x) y' + n y = 0,} \quad (11.98)$$

que é satisfeita por $y(x) = L_n(x)$ $(n \geq 0)$.

Polinômios de Laguerre Associados

O polinômio de Laguerre associado $L_n^s(x)$ é definido por

$$\boxed{L_n^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} L_n(x)} \quad (11.99)$$

Nota: Polinômio em x de grau $n-s$ $(n \geq s)$

Se diferenciarmos a (11.98) s vezes, tomando

$$\boxed{w = \frac{d^s}{dx^s} y} \quad (11.100)$$

e aplicando a regra de Leibnitz (11.78), vem

$$\frac{d^s}{dx^s}(x y'') = x w'' + s \frac{d^{s-1}}{dx^{s-1}}(y'') = x w'' + s w'$$

$$\frac{d^s}{dx^s}[(1-x) y'] = (1-x) w' - s w$$

Logo,

$$x w'' + s w' + (1-x) w' - s w + n w = 0$$

ou seja,

$$\boxed{x w'' + (s+1-x) w' + (n-s) w = 0} \quad (11.101)$$

que é a eq. diferencial dos polinômios de Laguerre associados. Tomando

$$\boxed{s = 2l+1 \;;\; n = n+l} \quad (11.102).$$

$$\Rightarrow \quad x w'' + [2l+2-x] w' + (n+l-2l-1) w = 0$$

e dividindo por x,

$$\boxed{w'' + \left[\frac{2(l+1)}{x} - 1\right] w' + \left[\frac{n-(l+1)}{x}\right] w = 0} \quad (11.103)$$

que é idêntico à (11.76). Logo, finalmente, vemos que as soluções da (11.76) são

$$g_{nl}(x) = N_{nl}\, L_{n+l}^{2l+1}(x), \qquad (11.104)$$

($L_{n+l}^{2l+1}(x)$: polinômio em x de grau $n-l-1 = N$)

onde N_{nl} é um fator de normalização.

Levando na (11.75),

$$f_{nl}(x) = N_{nl}\, x^{l+1} L_{n+l}^{2l+1}(x), \quad x = \frac{2r}{na_0} = \frac{2\rho}{n} \qquad (11.105)$$

e na (11.44), onde

$$\lambda = \lambda_{nl} = \frac{1}{na_0}, \qquad (11.106)$$

$$u_{nl}(r) = N_{nl}\, e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l+1} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \qquad (11.106)$$

Finalmente, voltando à (11.41), vemos que, redefinindo o fator de normalização

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi,t) = \mathcal{N}_{nl}\, e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) Y_{lm}(\theta,\varphi)\, e^{-iE_n t/\hbar} \qquad (11.107)$$

onde, pela (11.69),

$$E_n = -\frac{\mathcal{R}}{n^2}, \quad \mathcal{R} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \; ; \; a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \qquad (11.108)$$

($\mathcal{R}$: unidade Rydberg ($\approx 13{,}6$ eV); a_0: raio de Bohr $\approx 0{,}52$ Å)

21ª aula - 29-10-91 | 25ª aula - 20-6 | 24ª aula - 15-6

Cálculo do fator de normalização

$$\sum_{r=s}^{\infty} L_r^s(x)\frac{t^r}{r!} \equiv F_s(t,x) = \frac{\partial^s}{\partial x^s}\sum_{r=0}^{\infty} L_r(x)\frac{t^r}{r!} \qquad (11.10\text{?})$$

$$\equiv \frac{\partial^s}{\partial x^s} F(t,x)$$

(p/ $r \le s$ não contribui (deriv. de ordem s de um polinômio de grau $r \le s$ é $\equiv 0$)

Logo, pela (11.92)

$$F_s(t,x) = \frac{1}{1-t}\frac{\partial^s}{\partial x^s}\left[\exp\left(-\frac{t}{1-t}x\right)\right]$$

$$\left(-\frac{t}{1-t}\right)^s \exp\left(-\frac{tx}{1-t}\right)$$

ou seja,

$$\boxed{F_s(t,x) = \sum_{n=s}^{\infty} L_n^s(x)\frac{t^n}{n!} = \frac{(-)^s t^s}{(1-t)^{s+1}}\exp\left(-\frac{tx}{1-t}\right)} \quad (11.110)$$

é a função geratriz dos polins. de Laguerre associados.

Como os harmônicos esféricos já são normalizados, pl normalizar as (11.107) precisamos ter

$$\boxed{1 = \int |\psi_{nlm}(\vec{r})|^2 d^3r = |N_{nl}|^2 \int_0^{\infty} r^2 dr \cdot e^{-\frac{2r}{na_0}}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^{2l}\left[L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\right]^2} \quad (11.111)$$

$$\frac{2r}{na_0} = x \Rightarrow r = \frac{na_0}{2}x$$

$$\boxed{1 = |N_{nl}|^2\left(\frac{na_0}{2}\right)^3 \int_0^{\infty} e^{-x}\, x^{2l+2}\left[L_{n+l}^{2l+1}(x)\right]^2 dx,} \quad (11.112)$$

ou seja, temos que calcular esta $\int$:

$$\boxed{\begin{aligned} F_s(t,x) &= \sum_{n=s}^{\infty} L_n^s(x)\frac{t^n}{n!} = \frac{(-)^s t^s}{(1-t)^{s+1}} e^{-\frac{tx}{1-t}} \\ F_s(u,x) &= \sum_{p=s}^{\infty} L_p^s(x)\frac{u^p}{p!} = \frac{(-)^s u^s}{(1-u)^{s+1}} e^{-\frac{ux}{1-u}} \end{aligned}} \quad (11.113)$$

$(|u|<1,\ |t|<1)$

Multiplicando $F_s^{(t,x)}$ por $F_s^{(u,x)}$ e pelo fator $e^{-x}x^{s+1}$, e $\int$ de 0 a ∞, vem

$$\int_0^{\infty} e^{-x}x^{s+1}F_s(t,x)F_s(u,x)\,dx = \sum_{n=s}^{\infty}\sum_{p=s}^{\infty}\frac{u^p t^n}{p!\,n!}\int_0^{\infty} e^{-x}x^{s+1}L_n^s(x)L_p^s(x)$$

$$= \frac{(ut)^s}{(1-t)^{s+1}(1-u)^{s+1}}\int_0^{\infty} x^{s+1}e^{-x}\cdot e^{-x\frac{t}{1-t}}\cdot e^{-x\frac{u}{1-u}}\,dx \quad (11.114)$$

Queremos esta $\int$ pl $n=p=n+l$, $s=2l+1$

A $\int e'$

$$\int_0^\infty x^{s+1} \exp\left[-x\left(1+\frac{t}{1-t}+\frac{u}{1-u}\right)\right] dx$$

$$\frac{(1-t)(1-u)+t(1-u)+u(1-t)}{(1-t)(1-u)} = \frac{1-u-t+ut+t-ut+u-ut}{(1-t)(1-u)}$$

$$= \int_0^\infty x^{s+1} \exp\left[-x\,\frac{(1-ut)}{(1-t)(1-u)}\right] dx \qquad (11.115)$$

Mas $I_0 = \frac{1}{a}$

$$I_n = x^n \frac{e^{-ax}}{-a}\Big|_0^\infty + \frac{n}{a}\int_0^\infty x^{n-1} e^{-ax} dx = \frac{n}{a} I_{n-1};$$

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (n=0,1,2,\ldots;\ a>0). \qquad (11.116)$$

Como $|u|<1$, $|t|<1$, e $a>0$ na (11.115) e vem

$$\int_0^\infty x^{s+1} e^{-x\left(1+\frac{t}{1-t}+\frac{u}{1-u}\right)} dx = \frac{(1-t)^{s+2}(1-u)^{s+2}}{(1-ut)^{s+2}}(s+1)! \qquad (11.117)$$

do modo q o (11.114) fica

$$\sum_{n=s}^\infty \sum_{p=s}^\infty \frac{u^p t^n}{p!\,n!} \int_0^\infty e^{-x} x^{s+1} L_n^s(x) L_p^s(x)\, dx \qquad (11.118)$$

$$= (s+1)!\,\frac{(1-t)(1-u)}{(1-ut)^{s+2}}(ut)^s \qquad (|u|<1;\ |t|<1)$$

P/ calcular a (11.112), precisamos do coef. do termo genérico d $p=n=m$ na expansão do 2º mbro em série de potências de u e t.

Pela (11.90) d $p \to s+1$, $t \to ut$, $(|ut|<1)$

$$\frac{1}{(1-ut)^{s+2}} = \sum_{q=0}^\infty \binom{s+1+q}{q}(ut)^q \qquad (11.119)$$

$$= \sum_{q=0}^\infty \frac{(s+q+1)!}{q!\,(s+1)!}(ut)^q$$

Levando na (11.118),

$$\sum_{n=s}^{\infty}\sum_{p=s}^{\infty}\frac{u^p t^n}{p!\,n!}\int_0^\infty e^{-x}x^{s+1}L_n^s(x)L_p^s(x)\,dx = \cancel{(s+1)!}(1-t)(1-u)\sum_{q=0}^{\infty}\frac{(s+q+1)!}{q!\cancel{(s+1)!}}(ut)^{s+q} \tag{11.120}$$

O coef. da potência $p=n=m$ no 2º mbro. tem 2 contribs. [$(1-t)(1-u)=\underline{1}-t-u+\underline{ut}$], uma de $s+q=m$ e outra de $s+q=m-1$. Logo, identificando,

$$\frac{u^m t^m}{(m!)^2}\int_0^\infty e^{-x}x^{s+1}\left[L_m^s(x)\right]^2dx =$$

$$=u^m t^m\left[\frac{m!}{(m-s-1)!}+\frac{(m+1)!}{(m-s)!}\right]=\frac{m!}{(m-s-1)!}\left[1+\frac{m+1}{m-s}\right]u^m t^n$$

$$=\frac{m!(2m-s+1)}{(m-s)!}u^m t^m,$$

ou seja,

$$\int_0^\infty e^{-x}x^{s+1}\left[L_m^s(x)\right]^2dx=(2m-s+1)\frac{(m!)^3}{(m-s)!} \tag{11.121}$$

P/ aplicar à (11.112), tomamos $s=2l+1$, $m=n+l$, o q dá

$$\int_0^\infty e^{-x}x^{2l+2}\left[L_{n+l}^{2l+1}(x)\right]^2dx=2n\frac{[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \tag{11.122}$$

e, finalmente, dá (cf. (11.112))

$$\mathcal{N}_{nl}=-\left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2}\left\{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2} \tag{11.123}$$

completando o cálculo das autofunções (11.107).

convenção

$n - l - 1 \geq 0$

$l \leq n - 1$

Note que

$$n = N + l + 1 \,, \quad N \geq 0 \quad \left\{ \boxed{l \leq n-1} \right. \qquad (11.124)$$

e L_{n+l}^{2l+1} é um polinômio de grau $n-1-l = N$ (cf. (11.104)).

A parte <u>radial</u> da função de onda (11.107) é portanto

$$\boxed{R_{nl}(r) = -\left\{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2} e^{-\frac{x}{2}} x^l L_{n+l}^{2l+1}(x)} \qquad (11.125)$$

$$x = \frac{2r}{na_0} \,; \quad n = 1, 2, \ldots \,; \quad 0 \leq l \leq n-1$$

($= Zr$)

As cargas do elétron e do núcleo entram em R_{nl} somente através de $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$. Logo, p/ 1 íon hidrogenóide, pela (11.39), basta substituir

$$\boxed{a_0 \longrightarrow \frac{a_0}{Z}} \qquad (11.126)$$

<u>Probl. 48</u>. Calcular as funções de onda radiais para os estados ligados mais baixos do átomo de H:

$$\boxed{\begin{array}{lll}
\underline{n=1} & (1s) & R_{10} = \dfrac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{x}{2}} \quad \text{(est. fundamental)} \\
\underline{n=2} & (2s) & R_{20} = \dfrac{1}{2\sqrt{2}\, a_0^{3/2}} (2-x) e^{-\frac{x}{2}} \\
 & (2p) & R_{21} = \dfrac{1}{2\sqrt{6}\, a_0^{3/2}} x e^{-\frac{x}{2}} \\
\underline{n=3} & (3s) & R_{30} = \dfrac{1}{9\sqrt{3}\, a_0^{3/2}} (6 - 6x + x^2) e^{-\frac{x}{2}} \\
 & (3p) & R_{31} = \dfrac{1}{9\sqrt{6}\, a_0^{3/2}} (4-x) x e^{-\frac{x}{2}} \\
 & (3d) & R_{32} = \dfrac{1}{9\sqrt{30}\, a_0^{3/2}} x^2 e^{-\frac{x}{2}}
\end{array}} \qquad (11.127)$$

$x = \frac{2r}{na_0}$

11.6. O espectro do H e o modelo de Bohr

Newton: espectro da luz solar (1666)

Espectro de emissão. (1814)

Espectro de absorção: raias de Fraunhofer no esp. solar.

Kirchhoff + Bunsen (1856) { espectro característico do elemento químico; rel. entre esp. de emissão e absorção

Medida + precisa (J.C. Garreau et al., 1989): $\boxed{R_\infty = 109.737,3157{,}14\ cm^{-1}}$

Tipos de espectros $\begin{cases} \text{contínuo (corpo negro; rad. térmica; solar)} \\ \text{de bandas (moléculas)} \\ \text{de raias (átomos)} \leftarrow \text{Ex: vapor de Na (bico de Bunsen) prof. de escola secundária em Basel} \end{cases}$

Regularidades empíricas: Johannes Balmer (1885):

violeta H_δ — 4.102 Å
azul H_γ — 4340 Å
H_β — 4.861 Å
verm. H_α — 6.563 Å

Espectro do H no visível: série de Balmer

$$\boxed{\frac{\nu_n}{c} = \tilde{\nu}_n = \frac{1}{\lambda_n} = R_H\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)} \quad (11.128)$$

$n = 3, 4, 5 \ldots$ (H_α, H_β, H_γ)

onde

$$\boxed{R_H = \text{Constante de Rydberg do H} \approx 109.677{,}576\ cm^{-1}} \quad (11.129)$$

Mais tarde foram descobertas outras séries de raias do H; todas podiam ser expressas por generalizações da (11.128):

$$\boxed{\tilde{\nu}_{mn} = R_H\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)} \quad (11.130)$$

$n = m+1, m+2, \ldots$

$m=1 \rightarrow$ Série de Lyman (1906) (no ultravioleta)
$m=3 \rightarrow$ Série de Paschen
$m=4 \rightarrow$ " " Brackett (1922)
$m=5 \rightarrow$ " " Pfund (1924)
} no infravermelho

Estes resultados são exs. do princípio de combinação de Ritz (Rydberg) (1908), 2º o qual as raias espectrais observadas são sempre da forma

$$\boxed{\tilde{\nu}_{mn} = f(m) - f(n)}, \quad (11.131)$$

ñ só p/ o H, mas em geral

obtendo-se como diferenças entre 2 conjuntos de termos espectrais

Em 1911, c/ as experiências de Rutherford de espalhamento, foi formulado o modelo nuclear do átomo: elétrons ligados ao núcleo. Inexplicável classicamente (colapso p/ o núcleo: espectro contínuo de radiação seria emitido).

1913: Modelo de Bohr do átomo de H: novo conjunto de postulados:

(i) Órbitas clássicas, mas estáveis (clássicamente inexplicável) qdo. satisfeita a cond. de quantização do momento angular

Ecia de estados estacionários

Espectro de emissão: transições entre os níveis quantizados, c/

(ii) $$\boxed{h\nu_{mn} = E_n - E_m} \quad (11.132)$$

General. da rel. de Einstein

"Cond. de frequência" de Bohr

massa × aceler. centrípeta (MCU) ; c/ núcleo fixo (massa ∞)

Órbitas circulares: (11.133)

$$-\frac{mv^2}{r} = -\frac{e^2}{r^2} \Rightarrow r = \frac{e^2}{mv^2}$$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r} \quad \ldots\ldots \quad (11.134)$$

$$E = \underbrace{\frac{1}{2}\frac{e^2}{r}}_{T} - \underbrace{\frac{e^2}{r}}_{V} = -T = \frac{V}{2} = -\frac{e^2}{2r} \quad (11.135)$$

Quantização: $mvr = n\hbar \quad (n = 1, 2, \ldots)$ (11.136)

$$mv\frac{e^2}{mv^2} = \frac{e^2}{v} = n\hbar \quad \left\{ \frac{1}{v_n} = \frac{n\hbar}{e^2} \Rightarrow \left(\frac{v_n}{c} = \frac{\alpha}{n},\ \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \right) \right.$$

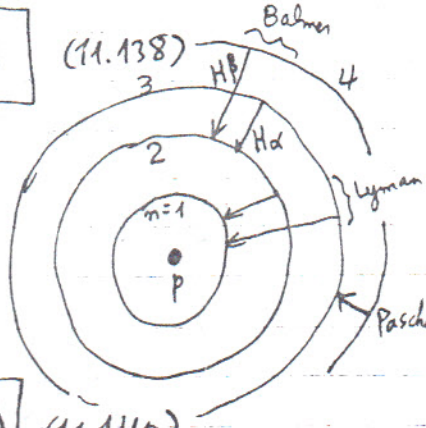
$$\therefore r_n = \frac{e^2}{m}\cdot\frac{n^2\hbar^2}{e^4} \Rightarrow r_n = n^2 a_0,\ a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (11.137)$$

$m \to \mu$ (massa reduzida)

$$E_n = -\frac{e^2}{2r} = -\frac{e^2}{2a_0}\cdot\frac{1}{n^2} = -\frac{\mathcal{R}}{n^2} \quad (11.138)$$

Cf. (11.70) $\mathcal{R} = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{me^4}{2\hbar^2}$ (11.139) $m \to \mu$ (Unidade Rydberg de energia)

o q concorda c/ os resultados acima.



$$(11.132) \Longrightarrow h\nu_{mn} = \mathcal{R}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

$$\therefore \tilde{\nu}_{mn} = \frac{\nu_{mn}}{c} = \frac{\mathcal{R}}{hc}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (11.140)$$

Comparando c/ a (11.130),

$$R_H = \frac{\mathcal{R}}{hc} \approx \frac{2{,}2\times10^{-11}\ \text{erg}}{6{,}6\times10^{-27}\times 3\times10^{10}} \approx \frac{2{,}2\times10^{-11}\ \text{cm}^{-1}}{2\times10^{-16}} \approx 1{,}1\times10^{5}\ \text{cm}^{-1}$$

o q concorda c/ a (11.129).

O princípio de correspondência

Classicamente, 1 partíc. carregada em movto periódico de frequência ν emitiria radiação de frequência ν (oscilador de Hertz).

No modelo de Bohr, a frequ. ν é dada por

$$v = \omega r \quad \left\{ \omega = \frac{v}{r} = \frac{mvr}{mr^2} = \frac{n\hbar}{m\cdot n^4 a_0^2} \right.$$

$$\Rightarrow \omega_n = \frac{\hbar}{ma_0^2 n^3} \quad (11.141)$$

[3ª lei de Kepler: período $\tau_n \propto n^3$
r_n = raio das órbitas $\propto n^2$
$\therefore (\tau_n)^2 \propto (r_n)^3$

$n = 10^3 \Rightarrow r_n \sim 10^6 a_0 \sim 10^{-2}$ cm $= 0{,}1$ mm!
$n \sim 10^2$ (át. de Rydberg dipíon) $\Rightarrow r_n \sim 10^{-3}$ mm $= 1\,\mu$m

P/ n gde., r se torna + "macroscópico" (átomos de Rydberg) e devemo-nos aproximar da sit. clássica. A frequ. de transição entre 2 órbitas vizinhas ($n+1 \to n$) deve aproximar-se da frequ. clássica (as órbitas são mto próxs.)

$$\omega_{n,n+1} = \frac{1}{\hbar}\left(E_{n+1} - E_n\right) = \frac{\mathcal{R}}{\hbar}\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}\right]$$

$$= \frac{\mathcal{R}(2n+1)}{\hbar\, n^2 (n+1)^2} \approx \frac{2\mathcal{R}}{\hbar\, n^3} \quad (n \gg 1) \qquad (11.142)$$

1ª aula 09-03-93

$$\mathcal{R} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \left\{ \frac{2\mathcal{R}}{\hbar} = \frac{\mu e^4}{\hbar^3} \right.$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \left\{ \frac{\hbar}{\mu a_0^2} = \frac{\hbar}{\mu} \cdot \frac{\mu^2 e^4}{\hbar^4} = \frac{\mu e^4}{\hbar^3} \right.$$

$$\Rightarrow \boxed{\omega_{n,n+1} \approx (\omega_n)_{cláss.} \quad n \gg 1} \qquad (11.143)$$

q é 1 ilustração do princípio de correspondência.

$J_k = \oint p_k\, dq_k = n_k \hbar$ (v. de ação)

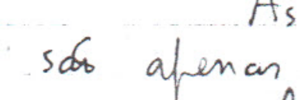
Órbitas elípticas de Bohr-Sommerfeld

As órbitas clássicas p/ atração Coulombiana ñ são apenas as circulares: como no caso gravitacional (Kepler), temos em geral órbitas elípticas (c/ o núcleo num foco) (modelo planetário).

(1916) Sommerfeld e Wilson, independentemente, formularam uma generalização da regra de quantização de Bohr, para sistemas mecânicos separáveis que podem ser descritos, na mecânica analítica clássica, em termos de variáveis ângulo-ação, o q se aplica às elipses keplerianas.

$\oint p_\varphi\, d\varphi = k\hbar$ ($= 2\pi p_\varphi = 2\pi L$)
$\oint p_r\, dr = n_r \hbar$

O resultado desta análise era q, em lugar de um único nº quântico n, apareciam 2: o nº quântico radial n_r, associado ao movimento na dir. radial (oscilação entre periélio e afélio: período), e o nº quântico azimutal k, assoc. ao momento angular (quantizado) total da órbita. A razão b/a entre os semieixos < e > da elipse está dada por



$$\boxed{\frac{b}{a} = \frac{k}{n_r + k} = \frac{k}{n}} \quad (k = 1, 2, \ldots,\ n = 1, 2, \ldots) \qquad (11.144)$$

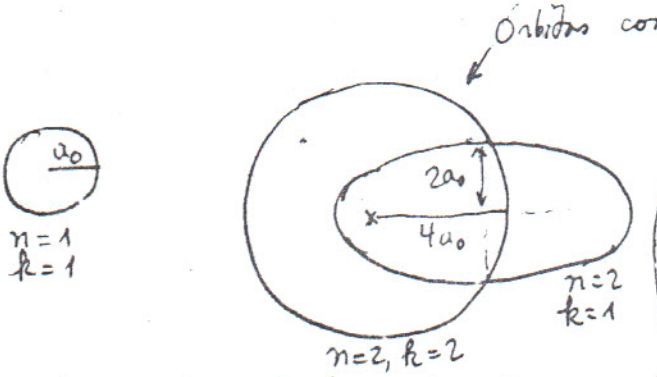
n: nº quântico principal

qto. > k, > o parâmetro de impacto e > o momento angular

onde $k = n$ só p/ órbitas circulares ($n_r = 0$)

Entretanto, a energia total de 1 órbita kepleriana elíptica só depende do eixo > da elipse:

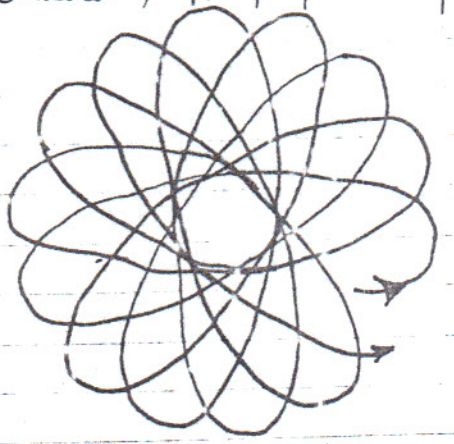
$$\boxed{E = -\frac{e^2}{2a}} \qquad (11.145)$$



O único outro pot central p/ o qual isto ocorre é $V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ (oscilador harmônico 3-D)

Logo, mmo. clássica de, todas as elipses de mmo. eixo > (caso particular: círculo) são degeneradas, i. é, são órbitas ≠s de mma. energia. Esta degenerescência é 1 peculiaridade do cpo. coulombiano (i. é, da lei de forças $1/(r^2)$): p/ esta lei de forças, temos órbitas fechadas (o período de oscil. radial em r entre os ptos de retorno ≡ ao período angular p/ dar 1 volta em torno da origem). Outra lei de forças p/ a qual isto acontece é o oscil. harmônico 3-D, de tipo potência de r: Força $= -k\vec{r}$.

P/ leis de forças ≠s destas, a órbita n é fechada; p/ pequenas perturbações da lei Coulombiana, p/ ex temos órbitas ≈te elípticas mas c/ precessão do eixo > da elipse, q gira (fig.) em lugar de permanecer fixo no espaço. Devemos esperar q isto aconteça em átomos c/ + de 1 elétron, pq. cada elétron vê o campo efetivo do núcleo blindado pela presença do outro elétron, o q muda a lei de forças Coulombiana efetiva. Logo, neste caso, a degenerescência entre níveis de mmo. n e ≠s mmos. ℓ res deve ser quebrada.



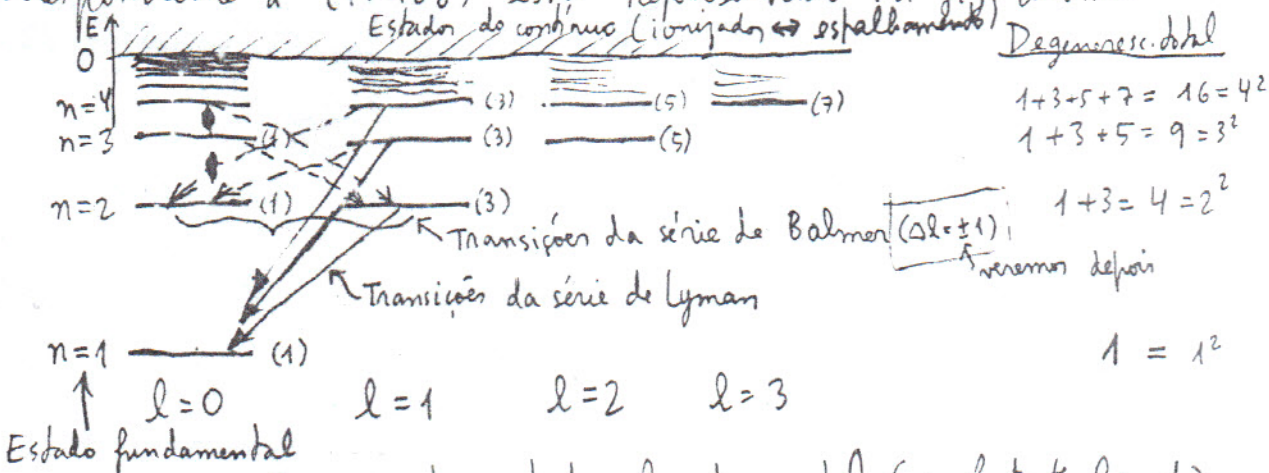
Falha da teoria de Bohr: Além de seu caráter "ad hoc", misturando f/s. clássica e quantização, vemos q a teoria de Bohr prediz os momentos angulares errados: p/ a "órbita" n, os mmos. ℓ res possíveis são $k=1,2,\ldots,n$, pdo. pela teoria quântica os valores corretos são $\ell (= k-1) = 0,1,2,\ldots,n-1$. Entretanto, o modelo de Bohr, formulado + de 1 década antes da MQ, teve importância decisiva no desenvolvim.to da física. Desempenha 1 papel análogo em rel. à teoria exata ao do "modelo vetorial" na teoria do momento angular.

22ª aula - 21.10.01 | 26ª aula 21-6 | 25ª aula - 18-6

11.7. Discussão dos resultados quânticos

O espectro de níveis de energia do H

correspondente à (11.108) está representado na fig. abaixo.



Energia do estado fundamental (+ forte^te ligado):

$$E_{1s} = -\mathcal{R} \quad (= -13{,}6 \text{ eV})$$

$|E_{1s}|$ é ób. a energia q é preciso transferir ao elétron p/ levá-lo do estado fundam. ao espectro contínuo, ou seja, p/ ionizar o átomo (energia de ionização do H).

$\exists$m ∞s níveis de energia discretos p/ cada l, c/ pto. de acumulação em $E=0$

Isto se deve ao decréscimo lento do pot. Coulombiano no ∞ ($\propto 1/r$), q permite ir acomodando + oscilações na função de onda p/ r gde. c/ variação cada vez < de energia. Pode-se mostrar q esta propr. permanece válida p/ potenciais q caem como $1/r^n$ p/ $r \to \infty$ com $n \leq 2$. P/ $n > 2$, o nº total de estados ligados é finito.

Degenerescência

Como a energia só depende do nº quântico principal n, todos os estados c/ mmo. n e ≠s valores de l e m são degenerados.

Degenerescência em m p/ 1 dado l } $m = -l, \ldots, l \Rightarrow (2l+1)$ (p/ ∀ potencial central)

Degenerescência em l p/ 1 dado n } $l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$

$$\Rightarrow \boxed{\text{Degenerescência total} = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2} \quad (11.146)$$

Esta última degenerescência de ≠s l p/ o mmo. n é peculiar ao [redacted] át. de H NR (e ao oscil. harmôn. 3D). "Classica^te", como vimos, tb. ∃, correspondendo ao caráter fechado das órbitas elípticas.

Vimos q a degenerescência dos estados de mmo. l e ±s m é consequência da simetria esférica do potencial V(r). A degenerescência dos estados de mmo. n e ±s l p/ o potencial Coulombiano Hr. pode ser explicada como consequência de 1 simetria, mas é 1 simetria bem menos aparente. Foi mostrado p/ V.A. Fock que a Hamiltoniana do átomo de H, escrita no espaço dos momentos, leva a 1 eq. de Schrö d. q possui simetria esférica num espaço de momentos 4-D em que a 4ª componente está ligada à energia do autoestado. A degenerescência em l p/ o H é consequência desta simetria.

Como já foi mencionado, esta degenerescência é levantada se o potencial deixa de ser exatamente Coulombiano.

Discussão das autofunções

Já discutimos a distrib. ângular de probabil., dada por $|Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2$. Tb. vimos a normaliz.

$$\int_0^\infty R_{n\ell}^2(r)\, r^2\, dr = 1 \qquad (11.147)$$

Logo, podemos considerar

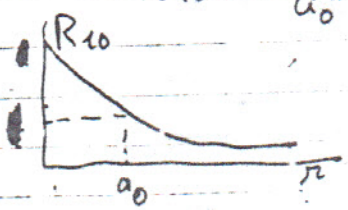
$$D_{n\ell}(r) = r^2 R_{n\ell}^2(r) \qquad (11.148) \qquad = u_{n\ell}^2(r)$$

como a densidade de probab. radial, c/ $D(r)\,dr$ dando a probab de encontrar o elétron entre r e r+dr do núcleo indep da direção.

(a) O estado fundamental (1s) ↔ esfericamente simétrico

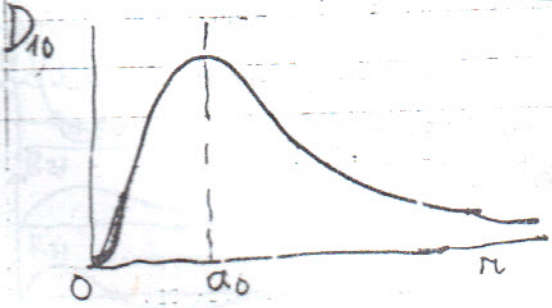
Pela (11.127),

$$R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}}, \quad x = \frac{2r}{a_0} \qquad \boxed{R_{10} = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_0}}} \quad (11.149)$$



c/ a dens. de probab. radial

$$D_{10} = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} \qquad (11.150)$$



$$\frac{d}{dr}\left(r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}\right) = 2r e^{-\frac{2r}{a_0}} - \frac{2}{a_0} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$= 2r e^{-\frac{2r}{a_0}}\left(1 - \frac{r}{a_0}\right) = 0 \;\text{p/}\; r = a_0$$

ou seja, a distância + provável é = ao raio de Bohr (da 1ª órbita

Rel. do princípio de incerteza: Se r_0 é a distância média do elétron ao núcleo, a energia pot. é da ordem de

$$V(r_0) \approx -\frac{e^2}{r_0}$$

1 elétron confinado dentro de 1 esfera de raio r_0 possui, pelo princ. de incerteza, 1 energia cinética mínima

$$T(r_0) \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m r_0^2} \quad \leftarrow (m \to \mu)$$

de modo que, p/ a energia total E,

$$E(r_0) \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m r_0^2} - \frac{e^2}{r_0} \qquad (11.151)$$

p/ $r_0 \to 0$, isto $\to +\infty$; p/ $r_0 \to \infty$, vai $\to 0$ (por valores negativos), de modo que há 1 compromisso, passando por 1 mínimo, p/ r_0 intermediário:

$$\frac{dE}{dr_0} = -\frac{\hbar^2}{m r_0^3} + \frac{e^2}{r_0^2} = 0 \left\{ \boxed{r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = a_0} \qquad (11.152) \right.$$

$(m \to \mu)$

e

$$E(a_0) = \frac{\hbar^2}{2m \cdot \frac{\hbar^4}{m^2 e^4}} - \frac{e^2 m e^2}{\hbar^2} \left\{ \boxed{E(a_0) = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = E(n=1) = -R} \qquad (11.153) \right.$$

q é a energia do estado fundamental.

(b) Estados excitados

$L_n(x)$ tem n zeros reais; $L_n^s(x) = \frac{d^s}{dx^s} L_n(x)$ tem $n-s$ zeros reais. Logo,

$L_{n+\ell}^{2\ell+1}$ tem $\underline{n-\ell-1 \text{ zeros reais}}$, que são superfícies nodais (esferas de raios r_j = zeros).

Já vimos que $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ tem ℓ suprfs. nodais (planos e cones).

Logo, $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi,t)$ tem $n-1$ suprfs. nodais (n = nº estado): o estado fundamental $n=1$ não tem nenhuma, o 1º excitado $n=1$ tem uma (radial ou angular), etc.: o nº quântico principal é = ao nº de suprfs. nodais da função de onda + 1.

A sit. + próxima das "órbitas circulares" de Bohr corresponde a $\underline{\ell = n-1}$:

$$R_{n,n-1}(r) = \mathcal{N}_{n,n-1}\, e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{n-1} L_{2n-1}^{2n-1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

$L_p^n(x)$ = polinômio de grau 0 = constante.

Logo, a densidade de probab. radial neste caso é

$$\boxed{D_{n,n-1}(r) = r^2 R_{n,n-1}^2(r) \propto e^{-x}\, x^{2n}} \quad (11.154)$$

$$\frac{d}{dx}\left(e^{-x}x^{2n}\right) = -e^{-x}x^{2n} + 2n\,x^{2n-1}e^{-x} = e^{-x}x^{2n-1}(2n-x)$$

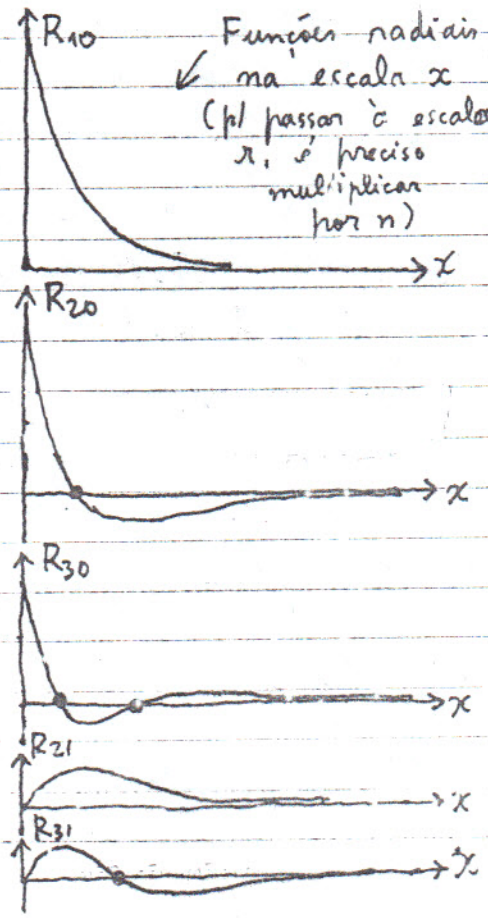
(não mín. pq não há nós)

de modo q a probab. é máxima p/

$$x = 2n = \frac{2r}{na_0} \;\Rightarrow\; \boxed{r_n = n^2 a_0} \quad (11.155)$$

q são os raios das "órbitas circulares" de Bohr. A função exponencial garante q a densidade de probab. cai rapidam^te a partir desse valor.

O fator r^{2l+2} em $D_{n,l}$ exclui encontrar o elétron na vizinhança do núcleo tanto + fortem^te q^to > for l, como é característico do momento angular orbital (barreira centrífuga).

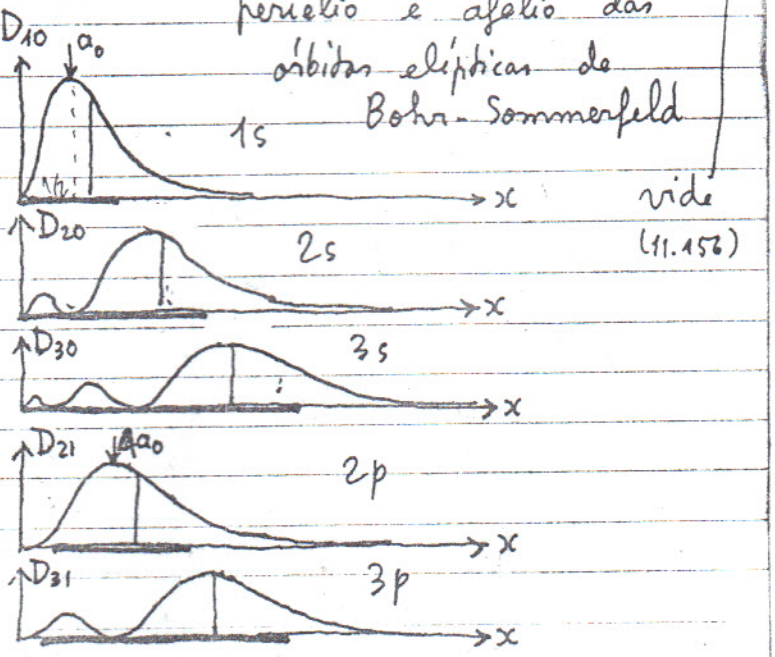


Funções radiais na escala x (p/ passar à escala r, é preciso multiplicar por n)

Distribs. de probab. radial na escala x

Linhas verticais: valores de $\langle r \rangle_{n\ell m}$

Em vermelho: região entre periélio e afélio das órbitas elípticas de Bohr-Sommerfeld



vide (11.156)

Pode-se mostrar que o valor esperado de r é dado por (prob. 44 abaixo)

$$\langle r \rangle_{n\ell(m)} = n^2 a_0 \left\{ 1 + \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\ell(\ell+1)}{n^2} \right] \right\} \qquad (11.156)$$

De acordo c/ o aumento da excentricidade da elipse qdo. ℓ diminui

que é $= \frac{3}{2}$ dos raios das órbitas de Bohr p/ os estados s e decresce p/ ≈ metade qdo. ℓ aumenta até ≈ de os raios de Bohr p/ $\ell = n-1$. Também se mostra que a média temporal de r numa órbita elíptica de Bohr-Sommerfeld de nºs quânticos (n, k) é dada por

$$\overline{r}_{nk} = n^2 a_0 \left\{ 1 + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k^2}{n^2} \right) \right\}, \qquad (11.157)$$

que difere da (11.156) pela substituição $k^2 \to \ell(\ell+1)$

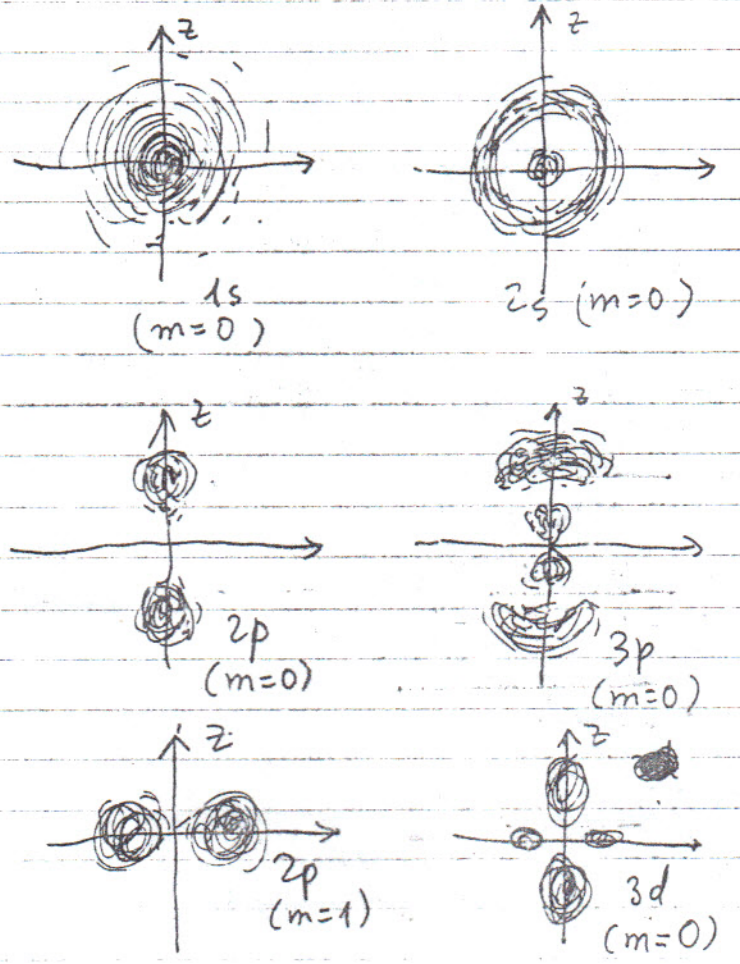
Uma idéia da distribuição espacial da dens. de probabilidade se obtém combinando estas distribs. " " radiais c/ as distribuições angulares associadas a $|Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2$, discutidas nas pgs. 185-187.

Mostrar as figs. do White

← As regiões + escuras são aquelas em que a dens. de probab. é >.

Não confundir c/ "distribs. de carga": são distribs. da probab. de encontrar o elétron (q, numa observação, é sempre encontrado como uma carga pontiforme).

O que é o "eixo z"? Como vimos, é 1 direção arbitrária c/p/ 1 átomo de H



isolado, "flutuando no ~~espaço~~ vácuo". Neste caso, todas as autofunções c/ o mesmo l e $m \neq$ p/ 1 potencial esferica^{te} simétrico são degeneradas e, pela simetria esférica, têm a mma. probabilidade de ser encontradas (mmo. peso estatístico), de modo que a distrib. de probabilidade seria, p/ dados n e l, proporcional a

$$\boxed{\sum_{m=-l}^{l} |\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi,t)|^2 = |R_{nl}(r)|^2 \sum_{m=-l}^{l} |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2} \quad (11.158)$$

Pode-se mostrar (teorema de adição dos harmônicos esféricos) que

$$\boxed{\sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\theta',\varphi') Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{(2l+1)}{4\pi} P_l(\cos\gamma)} \quad (11.159)$$

onde γ é o $\measuredangle$ entre as direções (θ,φ) e (θ',φ'), ou seja

$$\boxed{\cos\gamma = \cos\theta\cos\theta' + \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\theta' \cos(\varphi-\varphi')} \quad (11.160)$$

Em particular, p/ $\gamma = 0$,

$$\boxed{\sum_{m=-l}^{l} |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 = \frac{(2l+1)}{4\pi}} \quad (11.161)$$

Probl. 4a: Verificar, p/ $l = 0,1,2$, a (11.161)

que é independente de (θ,φ), restabelecendo a simetria esférica esperada.

Entretanto, se houver 1 campo externo, p/ ex. 1 cpo. elétrico ou magnético uniforme, a simetria esférica é quebrada e tb., geral.^{te}, a degenerescência, conforme veremos depois (podemos tomar como dir. z a direção do campo). Se o átomo ñ está isolado, mas ligado a outros átomos, tb. podemos ter propriedades direcionais, q explicam o caráter direcional das ligações químicas (valências dirigidas).

Probl. 50. Mostre a partir da (11.154) que p/ $l = n-1$ ($\forall m$),

$$\boxed{\langle r \rangle_{n,n-1} = n\left(n+\tfrac{1}{2}\right) a_0} \quad (11.162)$$

Sistemas hidrogenóides

(a) Isótopos do H: O hidrogênio tem como isótopos o deutério (núcleo P+N) e o trítio (núcleo P+2N).

MEC/FENAME

Os espectros são ligeiramente ≠s devido à correção de massa reduzida, que muda o valor da constante de Rydberg em cada caso. Pela (11.70),

$$R = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \qquad \mu = \frac{m_e M}{m+M} = \frac{m}{1+\frac{m}{M}}$$

de modo que

$$\boxed{\frac{R_D}{R_H} = \frac{\mu_D}{\mu_H} = \frac{1+\frac{m_e}{m_p}}{1+\frac{m_e}{m_d}} \approx \left(1-\frac{m_e}{2m_p}\right)\left(1+\frac{m_e}{m_p}\right) \approx 1+\frac{m_e}{2m_p}} \quad (11.163)$$

onde $m_e/m_p \approx \frac{1}{1836}$, de modo que a correção é $\sim 3\times10^{-4}$ p/ o deutério; um resultado análogo vale p/ o trítio.

Assim (cf. (11.129))

$$R_H \approx 109.678\ cm^{-1}$$
$$R_D \approx 109.708\ cm^{-1}$$

o q leva a ligeiros deslocamentos das raias espectrais p/ o deutério. A presença desses satélites na série de Balmer levou à descoberta do deutério (Urey, Brickwede e Murphy, 1931).

Íons hidrogenóides Para o He^+, temos 2 mudanças: a carga do núcleo é $Z=2$, e a massa é $\approx 4m_p$. Na constante de Rydberg, a principal mudança é que $e^4 \to (Ze^2)^2 = 4e^4$, de modo que obtemos em lugar da (11.130),

$$\boxed{(\tilde\nu_{mn})_{He^+} = 4R_{He}\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right)} \quad (11.164)$$

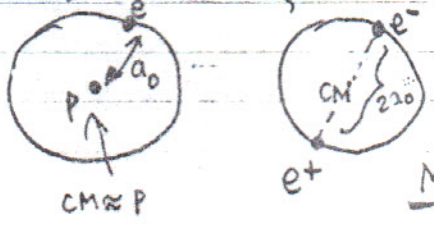
onde $R_{He} \approx R_H$ (acha-se $R_{He} \approx 109.722$). P/ $m=4$ e $n=2n'$, as (11.164) são muito próximas de $(\tilde\nu_{n'})_H$ (série de Balmer), e foram inicialmente (1895) confundidas c/ ela, mas depois se perceberam que eram devidas ao He^+ (séries de Fowler e de Pickering, esta p/ $m=2n'+1$, análoga a $n'+\frac{1}{2}$ na série de Balmer).

Mudanças análogas dão os espectros de Li^{++} e Be^{+++}.

Positrônio: É o sistema ligado formado por um e^- e um e^+ (pósitron ou elétron positivo, idêntico ao e^- exceto pela carga oposta)

$$m_{e^-} = m_{e^+} \Rightarrow \mu_{positrônio} = \frac{m_e}{2} \left.\begin{matrix} \\ \\ \end{matrix}\right\} (a_0)_{positrônio} = 2(a_0)_H$$
$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \qquad R_{e^+e^-} = \frac{1}{2}R_H$$

mesmo "tamanho"



O espectro óptico do positrônio foi observado recentemente; as freqs. são $\approx \frac{1}{2}$ das do H.

MAS é 1 sistema instável! $e^+ + e^-$ se aniquilam em fótons.

11.8. Estrutura Fina

Experimental^{te}, a degenerescência dos níveis de energia de mmo. n e l ≠ encontrada p/ o H ñ é verificada. As linhas espectrais, observadas c/ poder separador >, são múltiplas, formadas por linhas + finas mto. próximas (estrutura fina) (Ex. as linhas da série de Balmer do H são dubletos)

Isto já era conhecido qdo. Sommerfeld desenvolveu seu tratam^{to} c/ órbitas elípticas, e Sommerfeld deu uma explicação mto. bem sucedida, levando em conta efeitos relativísticos: numa órbita elíptica, como acontece c/ os planetas, a velocidade do elétron varia ao longo da órbita, e, segundo a relatividade restrita, a massa aparente do elétron varia com a velocidade, levando a uma variação da energia c/ k (mom. ∡r)

(lei das áreas conservação de l)

Usando as correções relativísticas, Sommerfeld obteve o seguinte resultado para a energia de ligação da orbita elíptica de n^{os} quânticos (n,k) (cf. (11.144)):

$$\boxed{\mathcal{E}_{n,k} - \mu c^2 = E_n\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4}\right)\right]} \quad (11.165)$$

$(k = 1, 2, \ldots, n)$

onde $E_n = -\frac{R}{n^2}$ é o resultado ñ-relativístico (NR) (11.69), $\mathcal{E}_{n,k}$ é a energia relativística total do elétron, que inclui a massa de reposo μc^2) e

$$R = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = \frac{\mu c^2}{2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = \frac{\mu c^2}{2}\alpha^2$$

$$\boxed{\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \simeq 0{,}0073} \quad (11.166)$$

é a célebre constante de estrutura fina, adimensional, introduzida por Sommerfeld. Como $\alpha^2 \sim 5\times10^{-5}$, as diferenças de energia entre as $n-1$ componentes do multipleto (11.165) correspondentes aos ±s momentos angulares p/ um dado n são mto. pequenas, justificando o nome de "estrutura fina".

Vejamos como se poderia procurar introduzir a correção relativística na eq. de Schrödinger. Sabemos q a eq. de Schröd. NR p/ estados estacionários equivale a

$$\boxed{E\psi = \hat{H}\psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V\right)\psi, \quad \hat{p} = -i\hbar\nabla} \quad (11.167) \text{ N.R.}$$

Na mecânica relativística, a energia

cinética é, em lugar de $T = \frac{\vec{p}^2}{2\mu}$, dada por

$$T = \sqrt{\mu^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2} - \mu c^2 \quad (11.168)$$

que se reduz à forma NR p/ $|\vec{p}| \ll \mu c$ (verifique!). Logo,

$$E = T + V = \sqrt{\mu^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2} - \mu c^2 + V(r) \quad (11.169)$$

o q dá, cf

$$E + \mu c^2 = \mathcal{E}, \quad (11.170)$$

$$\left[\frac{\mathcal{E}}{c} = c\sqrt{\vec{p}^2 + \mu^2 c^2} + V\right]$$

$$\left[\frac{\mathcal{E}}{c} - V(r)\right]^2 = \mu^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2 \quad (11.171)$$

Por analogia cf a (11.167), escrevemos então a eq. de onda relativística

$$\left[\mathcal{E}^2 - 2V(r)\mathcal{E} + V^2(r)\right]\psi = \left(\mu^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \Delta\right)\psi \quad (11.172)$$

ou ainda

$$\Delta\psi + \frac{1}{c^2\hbar^2}\left[V^2(r) - 2\frac{\mathcal{E}}{c}V(r)\right]\psi = \left(\frac{\mu^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{\mathcal{E}^2}{\hbar^2 c^2}\right)\psi \quad (11.173)$$

O potencial Coulombiano é

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} = -\frac{\alpha\hbar c}{r}, \quad (11.174)$$

onde α é a constante de estrutura fina (11.166). Para um íon hidrogênico, basta substituir

$$\alpha \longrightarrow Z\alpha \quad (11.175)$$

Para uma autofunção de momento angular l,

$$\psi^{\mathcal{E}}_{Nlm}(r,\theta,\varphi) = \frac{u_{Nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta,\varphi) \quad (11.176)$$

demos

$$\Delta\psi_{Nlm} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(u_{Nl}) \cdot Y_{lm} - \frac{l(l+1)}{r^2}\psi_{Nlm} \quad (11.177)$$

de modo q a eq. radial fica

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u + \frac{1}{c^2\hbar^2}\left(\frac{c^2\hbar^2\alpha^2}{r^2} + \frac{2\mathcal{E}\alpha c\hbar}{r}\right)u = \left(\frac{\mu^2c^2}{\hbar^2} - \frac{\mathcal{E}^2}{c^2\hbar^2}\right)u$$

ou seja,

$$\boxed{\frac{d^2u}{dr^2} + \left\{\left(\frac{2\alpha\mathcal{E}}{\hbar c}\right)\frac{1}{r} + \frac{[\alpha^2 - \ell(\ell+1)]}{r^2} - K^2\right\}u = 0} \quad (11.178)$$

onde

$$\boxed{K^2 = \frac{\mu^2c^2}{\hbar^2} - \frac{\mathcal{E}^2}{c^2\hbar^2}} \quad (11.179)$$

Comparando a (11.178) com a (11.47), vemos que só difere pelas substituições

$$\boxed{\frac{1}{a_0} \longrightarrow \frac{\alpha\mathcal{E}}{\hbar c}} \quad (11.180)$$

e

$$\boxed{\ell(\ell+1) \longrightarrow \ell'(\ell'+1) = \ell(\ell+1) - \alpha^2} \quad (11.181)$$

Logo, todo o resto do tratamento se aplica, e os níveis de energia, que para o H no caso NR eram dado pela cond. (11.64),

$$K_{N\ell}\, a_0 = \frac{1}{N+\ell+1}, \quad N = 0,1,2,\ldots$$

passam a ser dados por

$$\boxed{K_{N\ell} = \frac{\alpha\mathcal{E}_{N\ell}}{\hbar c}\left(\frac{1}{N+\ell'+1}\right) \qquad \begin{matrix}(N=0,1,2,\ldots.)\\ \ell' \geq 0\end{matrix}} \quad (11.182)$$

↑ regular na origem

ou seja, pela (11.179),

$$\frac{\mu^2c^2}{\hbar^2} - \frac{1}{c^2\hbar^2}\mathcal{E}_{N\ell}^2 = \frac{\alpha^2}{c^2\hbar^2}\mathcal{E}_{N\ell}^2\left(\frac{1}{N+\ell'+1}\right)^2$$

$$\mathcal{E}_{N\ell}^2\left\{1 + \frac{\alpha^2}{(N+\ell'+1)^2}\right\} = \mu^2c^4$$

$$\boxed{\mathcal{E}_{N\ell} = \mu c^2\left\{1 + \frac{\alpha^2}{(N+\ell'+1)^2}\right\}^{-1/2}} \quad (11.183)$$

↑ Excluindo a raiz quadrada negativa (cf. (11.169))

Probl. geral de "energias negativas" em eqs. relativísticas

$\mathcal{E}_{N\ell} < \mu c^2$ (ligado)

$\Delta W = 2S \cdot 2P \sim 0{,}365\ cm^{-1} \sim 1{,}3\times10^{-5} W_0$
$= \frac{R\alpha^2}{16}$

Pela (11.181),

$$l'^2 + l' - [l(l+1) - \alpha^2] = 0$$

Logo, como deve ser $l' \geq 0$ (p/ que $u(0)=0$),

$$l' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\underbrace{\frac{1}{4} + l(l+1)}_{(l+\frac{1}{2})^2} - \alpha^2} \quad \left\{ \quad \boxed{l' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}} \right. \quad (11.184)$$

$$l' = l - \frac{\alpha^2}{2(l+\frac{1}{2})} + O(\alpha^4)$$

e a (11.183) fica

$$\boxed{\begin{gathered} \mathcal{E}_{Nl} = \mu c^2 \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{\left[N+\frac{1}{2} + \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - \alpha^2}\right]^2} \right\}^{-1/2} = E_{Nl} + \mu c^2 \\ N = 0, 1, 2, \dots \ ; \ l = 0, 1, 2, \dots \end{gathered}} \quad (11.185)$$

o q quebra a degenerescência: ñ depende + de $N+l+1 \equiv n$, mas de n e l separadam.

Como $\alpha^2 \ll 1$, podemos expandir em série de pots. de α^2.

$$\sqrt{(l+\tfrac{1}{2})^2 - \alpha^2} = (l+\tfrac{1}{2})\left[1 - \frac{\alpha^2}{(l+\frac{1}{2})^2}\right]^{1/2} \approx (l+\tfrac{1}{2}) - \frac{\alpha^2}{2(l+\frac{1}{2})}$$

$$\frac{\alpha^2}{\left[N+\frac{1}{2}+\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2-\alpha^2}\right]^2} \approx \frac{\alpha^2}{\left[\underbrace{(N+\frac{1}{2})+(l+\frac{1}{2})}_{N+l+1=n} - \frac{\alpha^2}{2(l+\frac{1}{2})}\right]^2} = \frac{\alpha^2}{n^2}\left[1 - \frac{\alpha^2}{2(l+\frac{1}{2})n}\right]^{-2}$$

Notar que $(E_n)_{NR}$ é proporc. a α^2, logo, é preciso ir até $O(\alpha^4)$ (1ª correção relativística)

$$\approx \frac{\alpha^2}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n(l+\frac{1}{2})}\right] \quad \therefore$$

$$\boxed{\frac{\mathcal{E}_{Nl}}{\mu c^2}} = \left\{1 + \frac{\alpha^2}{n^2} + \frac{\alpha^4}{n^3(l+\frac{1}{2})}\right\}^{-1/2} \approx 1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha^4}{2n^3(l+\frac{1}{2})}$$

$$+ \frac{3}{8}\frac{\alpha^4}{n^4} + O(\alpha^6) = 1 - \frac{\alpha^2}{2n^2}\left\{1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right) + O(\alpha^4)\right\}$$

$$= 1 + \frac{E_{Nl}}{\mu c^2} \quad (11.186)$$

$$\frac{1}{2}\mu c^2 \alpha^2 = \mu c^2 \cdot \frac{e^4}{2\hbar^2 c^2} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = R$$

Logo, NR

$$E_{n,\ell} - \mu c^2 = E_n \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{\ell+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)\right] \qquad (11.187)$$

$n = 1, 2, \ldots$
$\ell = 0, 1, 2, \ldots$

Este resultado só difere do de Sommerfeld (11.165) pela substituição

$$k \longrightarrow \ell + \tfrac{1}{2} \qquad (11.188)$$
$$1, 2, 3, \ldots \longrightarrow \tfrac{1}{2}, \tfrac{3}{2}, \tfrac{5}{2}, \ldots$$

$k = j + \frac{1}{2}$, $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$ = mom. ang. total

$j = \ell \pm \frac{1}{2} \leftarrow [\vec{\ell} + \vec{s}]$ acoplamento spin-órbita

A experiência concorda c/ o resultado de Sommerfeld, e não com a (11.187)!

O que está errado?

Está faltando um dado novo fundamental na descrição do elétron: o elétron tem um grau de liberdade interno chamado de SPIN, cujo valor é $\frac{1}{2}$. O momento angular total é a resultante do spin com o momento angular orbital, e é isto que faz passar dos valores semi-inteiros aos inteiros na (11.188).

P/ obter o resultado correto, é preciso levar em conta tanto os efeitos relativísticos como o spin. As duas coisas foram feitas ao mesmo tempo por Dirac qdo. obteve a eq. de Dirac do elétron (1928). O átomo de H H. pode ser resolvido exatamente neste caso. O resultado encontrado só difere da (11.185) pela substituição $\ell + \frac{1}{2} \longrightarrow k$, onde $k (= 1, 2, \ldots)$ representa o momento angular total $[\pm\frac{1}{2}]$. A fórmula de Sommerfeld (11.165) é correta devido à compensação de 2 erros: ñ leva em conta nem a MQ nem o spin; a (11.187) só corrige o efeito relativístico, mas não o spin, e por isto é incorreta.

$2S_{1/2}$ e $2P_{1/2}$ ($\ell \neq$ mom. j)

Mesmo a fórmula de Dirac mantém a degenerescência p/ o mmo. momento angular total; experimentalmente, H. esta é quebrada (efeito Lamb-Retherford), mas a origem é bem + profunda: as "correções radiativas" tratadas na teoria quântica dos campos.

Cálculo de $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl}$ p/ o potencial Coulombiano

Curso de MQI, (11.41):

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 \frac{1}{r^3} r^2 dr = \int_0^\infty |u_{nl}(r)|^2 \frac{dr}{r^3}$$

$$\boxed{\psi_{nlm} = \underbrace{\frac{u_{nl}(r)}{r}}_{R_{nl}(r)} Y_{lm}(\theta,\varphi)} \quad , \quad \boxed{\int_0^\infty u_{nl}^2(r)\,dr = 1}$$

$\Downarrow$ (11.47)

$$\boxed{\frac{d^2u}{dr^2} + \left[\frac{2}{a_0 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - K^2\right]u = 0} \quad \begin{cases} E = -\frac{\hbar^2}{2\mu}K^2 \\ a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \end{cases} \quad \mu = \text{massa reduz.}$$

$$\boxed{\frac{r}{a_0} \equiv \rho \qquad K^2 a_0^2 = \varepsilon \Rightarrow E = -\underbrace{\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}}_{R} \cdot \varepsilon} \qquad \left(\varepsilon_n = \frac{1}{n^2}\right)$$

$\Downarrow$

$$\boxed{\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left[\frac{2}{\rho} - \varepsilon - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u = 0}$$

Multiply both sides by $\frac{du}{d\rho}$ and take $\int_0^\infty d\rho$

$$\Rightarrow \boxed{\underbrace{\frac{d^2u}{d\rho^2}\frac{du}{d\rho}}_{\frac{1}{2}\frac{d}{d\rho}\left\{\left(\frac{du}{d\rho}\right)^2\right\}} + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\underbrace{u\frac{du}{d\rho}}_{\frac{1}{2}\frac{d}{d\rho}(u^2)} - \varepsilon u \frac{du}{d\rho} = 0}$$

$$0 = \frac{1}{2}\underbrace{\int_0^\infty \frac{d}{d\rho}\left\{\left(\frac{du}{d\rho}\right)^2\right\}d\rho}_{=\left(\frac{du}{d\rho}\right)^2\Big|_0^\infty = 0} - \frac{\varepsilon}{2}\underbrace{\int_0^\infty \frac{d(u^2)}{d\rho}d\rho}_{=u^2(\rho)\Big|_0^\infty = 0} + \underbrace{\frac{1}{2}\int_0^\infty \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\frac{d}{d\rho}(u^2)\,d\rho}_{\int \text{ por partes}}$$

$\to l > 0$ $(l \geq 1)$

$$u_l(\rho) \sim \rho^{l+1} e^{-K\rho}$$

$$\therefore 0 = \underbrace{u^2(\rho)}_{O(\rho^{2l+2}e^{-K\rho})} \cdot \underbrace{\left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\Big|_0^\infty}_{=0 \to (l \geq 1)} - \underbrace{\int_0^\infty u^2(\rho)\left[-\frac{2}{\rho^2} + \frac{2l(l+1)}{\rho^3}\right]d\rho}_{2\left\{\left\langle \frac{1}{\rho^2}\right\rangle - \left\langle \frac{l(l+1)}{\rho^3}\right\rangle\right.}$$

ou seja, finalmente,

$$\boxed{\left\langle nl\left|\frac{1}{\rho^2}\right|nl\right\rangle = l(l+1)\left\langle nl\left|\frac{1}{\rho^3}\right|nl\right\rangle}$$

ρ^3/a_0^3

Finalmente,

$$\boxed{\left\langle nl\left|\frac{1}{r^3}\right|nl\right\rangle = \frac{1}{l(l+1)a_0}\left\langle nl\left|\frac{1}{r^2}\right|nl\right\rangle} \quad (l\neq 0)$$

Mas, aplicando o método da série de pots. à eq. #al, vimos que, p/ que a série termine, é preciso que

(independente da quantização de l)

$$\boxed{N = n-l-1 = \text{inteiro} \geq 0}, \quad l \geq 0 \quad (*)$$

e resulta

$$\boxed{\varepsilon_n = \frac{1}{n^2}}$$

com $\frac{dN}{dl} = \frac{\partial n}{\partial l} - 1 = 0$ (fixo)

ou seja, $u''_{nl}(\rho)$

$$\boxed{\frac{d^2u_{nl}}{d\rho^2} + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{1}{n^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u_{nl} = 0}$$

P/ N fixo, a $(*)$ define n como, e l, $n = n(l)$ e podemos derivar ambos os membros em relação a l:

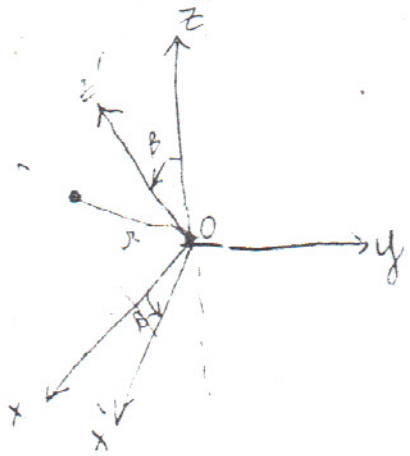
$$\frac{\partial}{\partial l}\left[\frac{u''_{nl}}{u_{nl}}\right] = -\frac{\partial}{\partial l}\left[\frac{2}{\rho} - \frac{1}{n^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] = \frac{-2}{n^3}\underbrace{\frac{\partial n}{\partial l}}_{=1} + \frac{(2l+1)}{\rho^2}$$

$$\therefore \quad \boxed{\frac{(2l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{n^3} = \frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{u''_{nl}}{u_{nl}}\right)}$$

Multiplicando ambos os membros por u_{nl}^2 e $\int_0^\infty d\rho$, vem,

como $\boxed{\int_0^\infty u_{nl}^2(r)\,dr = 1 = a_0\int_0^\infty u_{nl}^2(\rho)\,d\rho}$ e $\frac{1}{\rho^2} = \frac{a_0^2}{r^2}$,

Rotação de eixos



$$\begin{cases} y = y' \\ x = x'\cos\beta + z'\operatorname{sen}\beta \\ z = -x'\operatorname{sen}\beta + z'\cos\beta \end{cases} \qquad \begin{cases} (\beta = \measuredangle \text{Euler}) \\ r = r' \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{(x+iy)}{r} \\ Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r} \\ Y_{1,-1} = +\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{(x-iy)}{r} \end{cases} \times\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \begin{cases} y_{1,1} = -\frac{x+iy}{\sqrt{2}\,r} \\ y_{1,0} = \frac{z}{r} \\ y_{1,-1} = +\frac{x-iy}{\sqrt{2}\,r} \end{cases}$$

$$\frac{x}{r} = \frac{-1}{\sqrt{2}}\cdot(y_{1,+1} - y_{1,-1})$$

$$\frac{y}{r} = \frac{i}{\sqrt{2}}(y_{1,1} + y_{1,-1})$$

$$y_{1,0} = +\operatorname{sen}\beta\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(y'_{1,1} - y'_{1,-1}) + \cos\beta\, y'_{1,0}$$

$$\boxed{y_{1,0} = \frac{\operatorname{sen}\beta}{\sqrt{2}}y'_{1,1} + \cos\beta\, y'_{1,0} - \frac{\operatorname{sen}\beta}{\sqrt{2}}y'_{1,-1}}$$

$$y_{1,1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x'}{r}\cos\beta + \frac{z'}{r}\operatorname{sen}\beta\right) - i\frac{y'}{\sqrt{2}r}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2}}\left[-\frac{1}{\sqrt{2}}(y'_{1,1} - y'_{1,-1})\cos\beta + y'_{1,0}\operatorname{sen}\beta\right] - \frac{i}{\sqrt{2}}\frac{i}{\sqrt{2}}(y'_{1,1} + y'_{1,-1})$$

$$= \frac{1}{2}(y'_{1,1} + y'_{1,-1}) + \frac{1}{2}\cos\beta\,(y'_{1,1} - y'_{1,-1}) - \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\beta\, Y'_{1,0}$$

$$\boxed{y_{1,1} = \frac{1}{2}(1+\cos\beta)y'_{1,1} - \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\beta\, y'_{1,0} + \frac{1}{2}(1-\cos\beta)y'_{1,-1}}$$

$$y_{1,-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{r} - i\frac{y}{r}\right) = -\frac{1}{2}(y'_{1,1} - y'_{1,-1})\cos\beta + \frac{1}{\sqrt{2}}\operatorname{sen}\beta\, y'_{1,0} + \frac{1}{2}(y'_{1,1} + y'_{1,-1})$$

$$= +\frac{1}{2}(y'_{1,1})(1-\cos\beta) + \frac{\operatorname{sen}\beta}{\sqrt{2}}y'_{1,0} + \frac{1}{2}y'_{1,-1}(1+\cos\beta)$$

$$= \sum_{m=-l}^{l} D^{l}_{m,m'}\, Y_{l\,m'}$$

$m=0$ | Surfaces de | $m'=1 \rightarrow$ prob. $\frac{1}{2}\operatorname{sen}^2\beta$; $m'=0 \rightarrow$ " $\cos^2\beta$; $m'=-1 \rightarrow$ " $\frac{1}{2}\operatorname{sen}^2\beta$

$$(2l+1)a_0^3\left\langle nl\left|\frac{1}{r^2}\right|nl\right\rangle - \frac{2}{n^3}a_0 = \int_0^\infty d\rho\, u_{nl}^2(\rho)\frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{u''_{nl}}{u_{nl}}\right)$$

$(\cdot)' \equiv \frac{\partial}{\partial l}$

$$u^2\frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{u''}{u}\right) = u^2\cdot\frac{(\dot{u}''u - \dot{u}u'')}{u^2} = \dot{u}''u - \dot{u}u''$$

$$= \frac{d}{d\rho}(\dot{u}'u - \dot{u}u')$$

$$u \sim \rho^{l+1}e^{-k\rho}\left\{\begin{array}{l} u' \sim \rho^l e^{-k\rho} \\ \dot{u}' \sim \rho^l e^{-k\rho} \\ \frac{\partial u}{\partial l} \sim \rho^{l+1}e^{-k\rho}\end{array}\right\}$$

$$\therefore \int_0^\infty d\rho\, u_{nl}^2(\rho)\frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{u''_{nl}}{u_{nl}}\right) = \left[\left(\frac{\partial u}{\partial l}\right)'u - \frac{\partial u}{\partial l}u'\right]_0^\infty = 0$$

$$\therefore \left\langle nl\left|\frac{1}{r^2}\right|nl\right\rangle = \frac{2}{n^3(2l+1)a_0^2} = \frac{1}{(l+\frac{1}{2})n^3a_0^2}$$

$$\Downarrow$$

$$\left\langle nl\left|\frac{1}{r^3}\right|nl\right\rangle = \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)n^3a_0^3} \quad (l\neq 0)$$

P/ ión hidrogenoide, $a_0 \to \frac{a_0}{Z}$

$$\therefore \left\langle nl\left|\frac{1}{r^3}\right|nl\right\rangle = \frac{Z^3}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)n^3a_0^3}$$

Prova P3 de MQ1 - GABARITO

(1) (a) $\frac{d}{dt}\langle \hat{p}\hat{x}\rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar}\langle [\hat{p}\hat{x}, \hat{H}]\rangle_\psi$ . . . . . ⇒

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$

$[\hat{p}\hat{x}, \hat{H}] = \hat{p}[\hat{x}, \hat{H}] + [\hat{p}, \hat{H}]\hat{x}$ . . . . . ⇒

$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{2m}[\hat{x}, \hat{p}^2] = \frac{1}{m}[\hat{x}, \hat{p}]\hat{p} = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}$

$[\hat{p}, \hat{H}] = [\hat{p}, V(x)] = -i\hbar\left[\frac{\partial}{\partial x}, V(x)\right] = -i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}$

$\Rightarrow [\hat{p}\hat{x}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}^2 - i\hbar\frac{dV}{dx}\hat{x}$ . . . . . ⇒

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{p}\hat{x}\rangle_\psi = \left\langle \frac{\hat{p}^2}{m} - \hat{x}\frac{dV}{dx}\right\rangle_\psi}$$

(b) Se $\psi = \psi_E$ (estado estacionário), $\frac{d}{dt} = 0$,

$$\therefore \boxed{\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m}\right\rangle_{\psi_E} = \frac{1}{2}\left\langle \hat{x}\frac{dV}{dx}\right\rangle_{\psi_E}}$$

(c) P/ o oscilador harmônico, $\hat{V}(x) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$, $\therefore \frac{d\hat{V}}{dx} = m\omega^2\hat{x}$

$$\therefore \boxed{\langle \hat{T}\rangle_{\psi_E} = \frac{1}{2}\langle m\omega^2\hat{x}^2\rangle_{\psi_E} = \langle \hat{V}\rangle_{\psi_E}}$$

(2) (a) Integrando por partes,

$$\boxed{-\int_0^a \psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\,dx = \underbrace{-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\Big|_0^a}_{=0 \text{ porque } \psi(0)=\psi(a)=0} + \int_0^a \left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2 dx}$$

(b) Multiplicando por $+\frac{\hbar^2}{2m}$, obtemos

$$\boxed{\langle \hat{H}_0\rangle_\psi = \langle \hat{T}\rangle_\psi}$$

($\hat{H}_0$: part. livre; $\hat{T}$: en. cinética)

OK, porque a partícula está livre dentro da caixa ($V = 0$).

(3) $x^2+y^2+z^2=r^2$

$$\left.\begin{array}{l} x=r\,\mathrm{sen}\theta\cos\phi \\ y=r\,\mathrm{sen}\theta\,\mathrm{sen}\phi \end{array}\right\} \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy)=\frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathrm{sen}\theta\, e^{i\phi} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy)=\frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathrm{sen}\theta\, e^{-i\phi} \end{array} \Rightarrow \quad z=r\cos\theta$$

$$\Rightarrow \left.\begin{array}{l} Y_{1,1}=-\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\frac{x+iy}{\sqrt{2}\,r}\right) \\ Y_{1,-1}=+\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\frac{x-iy}{\sqrt{2}\,r}\right) \end{array}\right\} \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1,-1}-Y_{1,1})=\frac{x}{r}\;;\; \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{1,1}+Y_{1,-1})=\frac{y}{r}$$

$$Y_{1,0}=+\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\frac{z}{r}\right)$$

$$\therefore\ \psi(x,y,z)=N\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,r\,e^{-\alpha r^2}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1,-1}-Y_{1,1})+\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{1,1}+Y_{1,-1})+Y_{1,0}\right\}$$

$$\boxed{\psi(x,y,z)=\underbrace{N\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,r\,e^{-\alpha r^2}}_{\text{Função só de } r}\left\{-\frac{1}{\sqrt{2}}(1-i)Y_{1,1}+\frac{1}{\sqrt{2}}(1+i)Y_{1,-1}+Y_{1,0}\right\}}$$

Logo,

Resultados possíveis de medidas:

$$\hat{l}^2\psi=\hbar^2 1(1+1)\psi=2\hbar^2\psi$$

$$\hat{l}_z\psi=\left(\begin{array}{c}\pm 1\\ \text{ou}\\ 0\end{array}\right)\hbar\psi$$

$$\boxed{\hat{l}^2\longrightarrow 2\hbar^2\;;\quad \hat{l}_z\longrightarrow \pm\hbar \text{ ou } 0}$$

As probabilidades são proporcionais aos |coeficientes|^2 em $\{\dots\}$:

$$\left|\frac{-1}{\sqrt{2}}(1-i)\right|^2=\frac{1}{2}(1+1)=1=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(1+i)\right|^2.$$

ou seja, os 3 valores de m têm a mesma probabilidade:

$$\boxed{\text{Probabilidade de}\left\{\begin{array}{c}+\hbar\\ 0\\ -\hbar\end{array}\right\}=\frac{1}{3}}$$